



Université  
de Toulouse

# THÈSE

**En vue de l'obtention du  
DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE**

**Délivré par :**  
Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

**Discipline ou spécialité :**  
Energétique et transferts

---

**Présentée et soutenue par :**  
Clément INTROÏNI

**le :** vendredi 19 novembre 2010

**Titre :**

Interaction entre un fluide à haute température et un béton : contribution  
à la modélisation des échanges de masse et de chaleur

---

**JURY**

F. DUVAL, Ingénieur, IRSN Cadarache, Encadrant  
C. GALUSINSKI, Professeur des Universités, Université du Sud Toulon Var, Rapporteur  
D. GOBIN, Directeur de Recherche CNRS, Université Pierre et Marie Curie, Président  
B. GOYEAU, Professeur des Universités, Ecole Centrale Paris, Rapporteur  
M. QUINTARD, Directeur de Recherche CNRS, IMFT-INP Toulouse, Directeur de thèse

---

**Ecole doctorale :**  
Mécanique, Energétique, Génie civil et Procédés (MEGeP)

**Unité de recherche :**  
IMFT / IRSN

**Directeur(s) de Thèse :**  
Michel QUINTARD

**Rapporteurs :**  
Cédric GALUSINSKI  
Benoît GOYEAU

*à la mémoire de Daniel,  
à Amandine et mes parents,  
à Milouz . . .*

# Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé à l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire. A ce titre, je remercie Messieurs Richard Gonzalez et Jean-Michel Bonnet, chefs successifs du Service Etude et Modélisation de l'Incendie, du Corium et du confinement, pour m'avoir accueilli au sein de leur service et Madame Laurence Rigollet, chef du Laboratoire d'étude de l'Incendie et de développement de Méthodes pour la Simulation et les Incertitudes au sein duquel cette étude a été menée dans d'agréables conditions.

Je suis reconnaissant à Monsieur Michel Quintard, directeur de recherche CNRS à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, pour avoir accepté la direction scientifique de ce travail de thèse et pour la confiance qu'il m'a accordé au cours de notre collaboration. Ses conseils avisés et son expérience ont largement contribué à l'aboutissement de ce travail. Je le remercie également pour sa disponibilité et ses encouragements constants ont été d'un grand soutien, notamment lors de mon périple en Chine. Par ailleurs, chacune de nos visites Toulousaines a été l'occasion d'un agréable repas au bord de la Garonne au cours duquel j'ai pu apprécier davantage ses grandes qualités humaines et quelques bons vins du sud ouest.

Je remercie très chaleureusement Monsieur Fabien Duval, ingénieur à l'IRSN, pour avoir accepté l'encadrement de cette thèse et pour la confiance qu'il m'a accordé dès le début de mon stage de fin d'études. Durant toutes ces années, il a assuré un encadrement de très grande qualité avec enthousiasme, rigueur et une pédagogie exemplaire. Chacune de nos discussions et chacun de ses conseils avisés m'ont permis de progresser continuellement dans mon travail ("comme pour le calcul intégral de  $1/\sqrt{2\pi t} \dots$ "). Sa générosité et son implication ont non seulement été une source permanente de motivation mais ont aussi fortement contribué à l'aboutissement de ce projet de thèse. Par ailleurs, j'ai pu apprécier sa patience, sa constante disponibilité, ses encouragements quotidiens ainsi que l'amitié qu'il m'a témoigné durant toutes ces années. Pour le temps qu'il m'a consacré et tout ce qu'il m'a apporté durant toutes ces années, je lui en suis très reconnaissant.

Je remercie vivement Monsieur Dominique Gobin, directeur de recherche CNRS à l'Université Pierre et Marie Curie, pour avoir assuré la présidence du jury de cette thèse. Je remercie vivement Monsieur Cédric Galusinski, professeur des universités à l'Université Sud Toulon Var, et Monsieur Benoît Goyeau, professeur des universités à l'Ecole Centrale Paris, pour avoir accepté d'être rapporteurs de ce travail de thèse auquel ils ont apporté une attention et une rigueur particulière.

Mes remerciements vont également à Monsieur Jean-Claude Latché, ingénieur à l'IRSN, pour le suivi et le vive intérêt qu'il a montré à ce travail de thèse. Les conseils et l'aide précieuse qu'il m'a apporté sur différents aspects de ce travail ont fortement contribué à l'avancement de cette thèse. Je le remercie également pour sa constante disponibilité ainsi que pour nos diverses discussions qui m'ont permis d'apprécier ses grandes qualités humaines.

Je remercie également Monsieur Marc Barrachin, ingénieur à l'IRSN, pour ses conseils et son aide, notamment en thermodynamique sur la structure des énergies libres. Malgré une attirance prononcée pour un certain club de football de la capitale, j'ai particulièrement apprécié la sympathie, l'enthousiasme et les bonnes blagues de cet expert en thermodynamique des milieux condensés entre 2000K et 3000K.

Je tiens à remercier mes deux collègues de bureau successifs, Messieurs Bruno Piar et Fabrice Babik, ingénieurs à l'IRSN, pour leur sympathie, leur soutien et leurs encouragements. Durant toutes ces années, j'ai pu apprécier l'amitié qu'ils m'ont témoigné ainsi que nos diverses discussions autour d'une tasse de thé ou de café. Je remercie plus particulièrement Bruno pour m'avoir fait profiter de son expérience à chacune de mes sollicitations et pour l'aide précieuse qu'il m'a apporté pour les développements menés à partir de la plate-forme PELICANS. Je le remercie également pour m'avoir laissé *squatter* plusieurs de ses livres durant toutes ces années.

Je souhaite remercier Monsieur Didier Vola, chef du Laboratoire d'Etude du corium et du Transfert des Radioéléments, pour m'avoir fait profiter de ses connaissances sur les méthodes de stabilisation numérique et pour l'aide qu'il m'a apporté dans certaines de mes démarches *post-doctorat*.

Je voudrais remercier l'ensemble du personnel du SEMIC pour leur accueil et leur gentillesse. Merci à Michel Cranga pour le vive intérêt qu'il a porté à ce travail. Merci à Marie-Claire, Caroline et Laetitia pour l'aide qu'elles m'ont apporté dans chacune de mes démarches administratives et plus particulièrement dans la préparation de mon voyage en Chine. Je remercie Jean-Paul, Jean-Claude, Christophe, Marc, Bruno, Fabien, Philippe, Roland, Jean, Samuel, Laura et Céline pour nos grandes discussions footballistiques dans lesquelles j'ai essayé tant bien que mal de rester objectif. . . . Je remercie l'ensemble des doctorants que j'ai pu côtoyer, Aurélien, Guillaume, Romain, Walid, Trung, Fanny et Raphaël pour leur sympathie. Merci à Sebastian pour ses encouragements et l'amitié qu'il m'a témoigné durant nos trois années de thèse. Un grand merci à Céline pour sa bonne humeur, son amitié et son soutien. Je n'oublie pas ses longues pauses à discuter à la machine à café (que je remercie par la même occasion !) au cours desquelles j'ai pu apprécier ses grandes qualités humaines. Merci à Haisan pour son amitié et pour m'avoir servi de guide sur Guangzhou.

Je tiens à remercier ma famille pour leur amour et leur soutien permanent. Je remercie enfin Amandine pour m'avoir soutenu et encouragé durant toutes ces années avec amour et beaucoup de patience. Pour tout ce qu'elle m'apporte au quotidien, je lui en suis très reconnaissant et lui dédicace ce travail.

# Table des matières

CHAPITRE I Introduction générale	1
I.1 Problématique du corium hors-cuve . . . . .	2
I.2 Phénoménologie . . . . .	3
I.3 Description des échanges à l’interface du corium et du béton . . . . .	5
I.3.1 Modèles d’échange associés au dégazage . . . . .	7
I.3.2 Modèles d’échange associés à la convection compositionnelle . . . . .	9
I.3.3 Modèles d’échange globaux . . . . .	12
I.3.4 Discussion . . . . .	15
I.4 Stratégie de modélisation et description de l’étude . . . . .	16
I.4.1 Vers une description multi-échelle . . . . .	16
I.4.2 Simulation numérique directe à l’échelle du front d’ablation . . . . .	19
I.5 Objectifs de l’étude . . . . .	21
CHAPITRE II Construction de conditions aux limites effectives sur parois rugueuses	23
II.1 Introduction . . . . .	23
II.2 Effective surface modeling for momentum and heat transfers over rough surfaces . . . . .	24
II.2.1 Introduction . . . . .	27
II.2.2 Domain decomposition method . . . . .	30
II.3 Effective boundary conditions . . . . .	31
II.3.1 Momentum effective boundary condition . . . . .	32
II.3.2 Heat effective boundary conditions . . . . .	39
II.3.3 Application to a natural convection problem in a stamp shaped cavity . . . . .	43
II.3.4 Determination of the effective properties . . . . .	44
II.3.5 Effective calculations . . . . .	48
II.3.6 Conclusion . . . . .	56
II.3.A Derivation of the closure problems for the momentum transfer problem . . . . .	57
II.3.B Derivation of the closure problems for the heat transfer problem . . . . .	58
II.4 Conclusion . . . . .	59
CHAPITRE III Simulation numérique directe d’écoulements diphasiques compositionnels	69
III.1 Modèle de Cahn-Hilliard diphasique . . . . .	70
III.2 Modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel . . . . .	74
III.2.1 Description du système et hypothèses . . . . .	74
III.2.2 Fermeture thermodynamique . . . . .	76
III.2.3 Etablissement des équations de bilan . . . . .	79
III.2.4 Propriétés de consistance et fermetures des mobilités . . . . .	85
III.2.5 Formes alternatives du modèle . . . . .	88



III.3	Schéma numérique et résolution du problème discret . . . . .	90
III.3.1	Semi-discrétisation en temps . . . . .	91
III.3.2	Discrétisation en espace . . . . .	99
III.4	Stabilisation par viscosité entropique . . . . .	106
III.4.1	Principe de la méthode . . . . .	107
III.4.2	Application au modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel . . . . .	108
III.5	Traitement numérique des conditions aux limites de sortie . . . . .	111
III.5.1	Equations de Cahn-Hilliard . . . . .	111
III.5.2	Equations de Navier-Stokes . . . . .	113
III.6	Expériences numériques . . . . .	115
III.6.1	Test de Laplace compositionnel . . . . .	118
III.6.2	Montée d’une bulle dans un milieu semi-infini . . . . .	120
III.6.3	Injection de bulles dans un milieu semi-infini . . . . .	123
III.6.4	Injection de bulles dans un système bi-constituant . . . . .	125
III.7	Conclusions . . . . .	136
CHAPITRE IV	Simulations directes à l’échelle du front d’ablation . . . . .	139
IV.1	Cas purement compositionnels . . . . .	140
IV.1.1	Description de l’ablation par une méthode ALE . . . . .	142
IV.1.2	Lois de viscosité arithmétique et harmonique . . . . .	144
IV.1.3	Modèle de viscosité d’Urbain . . . . .	155
IV.2	Cas diphasiques compositionnels . . . . .	190
IV.2.1	Description de l’ablation dans le repère lié au front . . . . .	191
IV.2.2	Impact de la température d’ablation . . . . .	195
IV.2.3	Impact de la distribution des sites de relâchement de gaz . . . . .	207
IV.3	Conclusion et discussion des configurations étudiées . . . . .	220
CHAPITRE V	Conclusion générale et perspectives . . . . .	223
ANNEXE A	Limite “sharp” du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel . . . . .	231
A.1	Adimensionnement des équations . . . . .	231
A.2	Analyse asymptotique du modèle . . . . .	233
A.2.1	Développements extérieurs . . . . .	234
A.2.2	Développements intérieurs . . . . .	236
A.2.3	Conditions de saut à l’interface . . . . .	244
ANNEXE B	Système de coordonnées généralisé . . . . .	249
B.1	Définition d’un système de coordonnées lié à l’interface . . . . .	249
B.2	Développement des opérateurs de dérivées spatiale et temporelle . . . . .	250
B.2.1	Gradient d’un scalaire . . . . .	250
B.2.2	Gradient d’un vecteur . . . . .	250
B.2.3	Divergence d’un vecteur . . . . .	251
B.2.4	Divergence du gradient d’un champ scalaire . . . . .	251
B.2.5	Divergence d’un tenseur d’ordre deux . . . . .	251
B.2.6	Dérivée temporelle . . . . .	252
ANNEXE C	Raccord asymptotique . . . . .	253

# Table des figures

I.1	Schéma simplifié d'un scénario d'accident grave : cas de l'interaction corium-béton. . . .	2
I.2	Configurations envisagées pour le bain de corium lors de l'interaction corium-béton. . . .	3
I.3	Diagramme de phases pseudo-binaires pour les mélanges $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2\text{-béton}$ . . . . .	6
I.4	Schéma de l'interface lors de l'ablation d'un substrat solide par un liquide. . . . .	10
I.5	Représentation de l'interface corium-béton proposée par Bradley [27] . . . . .	12
I.6	Représentation de l'interface corium-béton proposée par Kao et Kazimi [95]. . . . .	13
I.7	Représentation de l'interface corium-béton proposée par Epstein [53]. . . . .	15
I.8	Une description multi-échelle des échanges pour l'interaction corium-béton. . . . .	17
II.1	Schematic representation of an incompressible laminar over a rough surface $\Gamma_w$ . . . . .	29
II.2	Schematic domain decomposition principle . . . . .	30
II.3	Schematic decomposition of the rough surface in two closed curves. . . . .	39
II.4	Schematic representation of the computational domain $\Omega = [0, L] \times [0, L]$ . . . . .	43
II.5	Thinnest mesh used in the rough case. . . . .	44
II.6	Pseudo-periodic representative unit cell $\Omega_i$ . . . . .	45
II.7	Plot of the ratio $C_f(\delta_0)/C_f(y)$ and the ratio $h(\delta_0)/h(y)$ for $\text{Re}_\ell \leq 10^3$ and $\text{Pr} = 1$ . . . .	46
II.8	Plot of the quantity $[B_{11}(\delta_0) + \delta_0]/L_1$ and $[d(\delta_0) + \delta_0]/L_2$ in the pure diffusive case. . .	47
II.9	Evolution of the ratio $h(0)$ in the pure diffusive case over $h(\text{Re}_\ell)$ . . . . .	48
II.10	Contour lines of the closure variable $d$ for $\text{Pr} = 1$ . . . . .	48
II.11	Contour lines of $T$ and $\mathbf{u}$ in the rough and effective no-slip cases ( $\text{Ra}_L = 10^6$ ). . . . .	50
II.12	Profiles of $T$ and $v$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$ for $\text{Ra}_L = 10^6$ . . . . .	51
II.13	Profiles of $T$ and $v$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$ for $\text{Ra}_L = 10^6$ . . . . .	52
II.14	Profiles of $T$ and $v$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\text{Ra}_L = 10^6$ . . . . .	53
II.15	Effective computational domain $\Omega_\delta$ . . . . .	54
II.16	Profiles of $T$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\text{Ra}_L = \{10^3, 10^4\}$ . . . . .	61
II.17	Profiles of $T$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\text{Ra}_L = \{10^5, 10^6\}$ . . . . .	62
II.18	Profiles of $T$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\text{Ra}_L = \{10^7, 10^8\}$ . . . . .	63
II.19	Profiles of $v$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\text{Ra}_L = \{10^3, 10^4\}$ . . . . .	64
II.20	Profiles of $v$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\text{Ra}_L = \{10^5, 10^6\}$ . . . . .	65
II.21	Profiles of $v$ on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\text{Ra}_L = \{10^7, 10^8\}$ . . . . .	66
II.22	Relative error between the averaged Nusselt numbers $\langle \text{Nu}_r \rangle$ and $\langle \text{Nu}_{eff} \rangle$ . . . . .	67
III.1	Evolution du paramètre d'ordre $\varphi$ pour un système diphasique. . . . .	71
III.2	Formes logarithmique et polynomiale du potentiel de Cahn-Hilliard. . . . .	74
III.3	Formes logarithmique et logarithmique-polynomiale du potentiel de Cahn-Hilliard. . . .	78
III.4	Schémas numériques : deux <i>vs.</i> trois équations (problème diphasique $\varphi_3 = 0$ ). . . . .	92
III.5	Schémas numériques : deux <i>vs.</i> trois équations (problème diphasique $\varphi_2 = 0$ ). . . . .	93
III.6	Discrétisations imp., lin. implicite et semi-implicite de $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ ( $\Delta t = 10^{-4}$ ) . . . .	95
III.7	Discrétisations imp., lin. implicite et semi-implicite de $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ ( $\Delta t = 2 \times 10^{-5}$ ) . .	96

III.8	Discrétisations imp., lin. implicite et semi-implicite de $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ ( $\Delta t = 4 \times 10^{-6}$ ) . . .	96
III.9	Instabilité de Rayleigh-Taylor avec $At = 0.5$ et $Re = 10^3$ : interface liquide-liquide. . . .	109
III.10	Instabilité de Rayleigh-Taylor avec $At = 0.5$ et $Re = 10^3$ : viscosité entropique . . . . .	110
III.11	Domaine de calcul : traitement numérique des conditions aux limites de sortie . . . . .	113
III.12	Comportement d'une bulle de gaz en sortie du domaine (vitesse imposée) . . . . .	114
III.13	Composante verticale de la vitesse en sortie du domaine . . . . .	115
III.14	Comportement d'une bulle de gaz en sortie du domaine . . . . .	116
III.15	Pression $\tilde{p}$ , pression dynamique $p_{dyn}$ et pression capillaire $p_{cap}$ . . . . .	117
III.16	Domaines de calcul utilisés pour le test de Laplace compositionnel. . . . .	119
III.17	Modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel <i>vs.</i> modèle de Fick/Navier-Stokes. .	121
III.18	Profils du paramètre d'ordre $\varphi_2$ et de la concentration $c$ en $y = 0$ à $t = \{0\text{ s}, 0.5\text{ s}, 1\text{ s}\}$ . . .	122
III.19	Comparaison entre la loi de Laplace et le saut de pression calculé. . . . .	122
III.20	Décroissance de l'énergie cinétique au cours du temps. . . . .	123
III.21	Domaine de calcul : montée d'une bulle de gaz dans un milieu liquide semi-infini. . . .	124
III.22	Instantanés de l'isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ et évolution du nombre de Reynolds . . . . .	125
III.23	Mobilité uniforme <i>vs.</i> mobilité fonction du Péclet d'interface. . . . .	126
III.24	Visualisation de la mobilité : uniforme et fonction du nombre de Péclet d'interface. . . .	126
III.25	Domaine de calcul : problème diphasique d'injection de gaz à travers un orifice. . . . .	127
III.26	Evolution de l'isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ pour les angles de contact $\alpha = 70^\circ$ et $\alpha = 110^\circ$ . . . . .	128
III.27	Domaine de calcul : injection de gaz dans un système bi-constituant. . . . .	129
III.28	Calcul de référence. . . . .	131
III.29	Calcul sans contraste de viscosité dans le liquide . . . . .	132
III.30	Calcul sans contraste de densité dans le liquide . . . . .	133
III.31	Calcul effectué avec un diffusion massique $D = 2 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . . . . .	134
III.32	Calcul effectué avec les propriétés de référence et deux sites d'injection de gaz . . . . .	135
IV.1	Représentation schématique de la structure de la couche limite . . . . .	140
IV.2	Domaine de calcul utilisé pour l'étude des effets purement compositionnels. . . . .	142
IV.3	Comparaison entre les lois arithmétique, harmonique et d'Urbain. . . . .	145
IV.4	Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$ : cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^2$ ; loi arithmétique. . . . .	147
IV.5	Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$ : cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^2$ ; loi harmonique. . . . .	148
IV.6	Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$ : cas $\mathcal{R} = 10^3$ ; loi arithmétique. . . . .	150
IV.7	Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$ : cas $\mathcal{R} = 10^3$ ; loi harmonique. . . . .	151
IV.8	Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$ : cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^4$ ; loi arithmétique. . . . .	153
IV.9	Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$ : cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^4$ ; loi harmonique. . . . .	154
IV.10	Fraction de solide $\Phi_{sol}$ en fonction de la température et de l'enrichissement en béton . .	156
IV.11	Viscosité du mélange en fonction de la température et de l'enrichissement en béton . . .	157
IV.12	Schématisation du front d'ablation avec la prise en compte d'une zone pâteuse. . . . .	158
IV.13	Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$ : cas $T_f = 1600\text{K}$ , béton silico-calcaire. . . . .	162
IV.14	Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$ : cas $T_f = 1600\text{K}$ , béton siliceux. . . . .	163
IV.15	Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 1600\text{K}$ . Amplitude des rugosités. . .	164
IV.16	Champ de vitesse à l'instant $t = 150\text{s}$ . . . . .	165
IV.17	Evolution de la fraction de solide $\Phi_{sol}$ pour une température d'ablation $T_f = 1600\text{K}$ . . .	166
IV.18	Evolution de la température $T$ pour une température d'ablation $T_f = 1600\text{K}$ . . . . .	167
IV.19	Profil de température (en K) suivant l'axe ( $Oy$ ) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150\text{s}$ . . . . .	168
IV.20	Vitesse moyenne d'ablation (en $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$ ) : $T_f = 1600\text{K}$ . . . . .	169
IV.21	Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$ : cas $T_f = 1700\text{K}$ , béton silico-calcaire. . . . .	172
IV.22	Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$ : cas $T_f = 1700\text{K}$ , béton siliceux. . . . .	173
IV.23	Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 1700\text{K}$ . Amplitude des rugosités. . .	174
IV.24	Champ de vitesse à l'instant $t = 150\text{s}$ . . . . .	175

IV.25	Evolution de la fraction de solide $\Phi_{sol}$ pour une température d'ablation $T_f = 1700K$ . . .	176
IV.26	Evolution de la température $T$ pour une température d'ablation $T_f = 1700K$ . . . . .	177
IV.27	Profil de température (en K) suivant l'axe ( $Oy$ ) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150s$ . . . . .	178
IV.28	Vitesse moyenne d'ablation (en $mm.s^{-1}$ ) : $T_f = 1700K$ . . . . .	179
IV.29	Evolution de la densité pour $t \in [0, 70s]$ : cas $T_f = 2000K$ , béton silico-calcaire. . . . .	182
IV.30	Evolution de la densité pour $t \in [0, 26s]$ : cas $T_f = 2000K$ , béton siliceux. . . . .	183
IV.31	Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 2000K$ . Amplitude des rugosités. . .	184
IV.32	Champ de vitesse aux instants $t = 70s$ (béton silico-calcaire) et $t = 26s$ (béton siliceux) .	185
IV.33	Evolution de la fraction de solide $\Phi_{sol}$ pour une température d'ablation $T_f = 2000K$ . . .	186
IV.34	Evolution de la température $T$ pour une température d'ablation $T_f = 2000K$ . . . . .	187
IV.35	Profil de température (en K) suivant l'axe ( $Oy$ ) en $x = R/2$ . . . . .	188
IV.36	Vitesse moyenne d'ablation (en $mm.s^{-1}$ ) : $T_f = 2000K$ . . . . .	189
IV.37	Vitesse moyenne d'ablation (en $mm.s^{-1}$ ) : $T_f = 1700K$ . . . . .	192
IV.38	Comparaison des approches proposées pour décrire l'ablation du radier (silico-calcaire) .	193
IV.39	Comparaison des approches proposées pour décrire l'ablation du radier (siliceux) . . . .	194
IV.40	Domaine de calcul $\Omega$ utilisé pour l'étude des effets diphasiques compositionnels. . . . .	195
IV.41	Diffusion du mélange en fonction de la température et de l'enrichissement en béton . . .	197
IV.42	Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9s]$ : cas $T_f = 1700K$ , béton silico-calcaire. . . . .	201
IV.43	Evolution de la densité pour $t \in [0, 4s]$ : cas $T_f = 1700K$ , béton siliceux. . . . .	202
IV.44	Evolution de $\Phi_{sol}$ pour $t \in [0, 3.9s]$ : cas $T_f = 1700K$ , béton silico-calcaire.. . . .	203
IV.45	Evolution de $\Phi_{sol}$ pour $t \in [0, 4s]$ : cas $T_f = 1700K$ , béton siliceux. . . . .	204
IV.46	Champ de vitesse dans le cas des bétons silico-calcaire et siliceux. . . . .	205
IV.47	Vitesse moyenne d'ablation (en $mm.s^{-1}$ ) . . . . .	206
IV.48	Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9s]$ : cas $T_f = 2000K$ , béton silico-calcaire. . . . .	208
IV.49	Evolution de la densité pour $t \in [0, 4s]$ : cas $T_f = 2000K$ , béton siliceux. . . . .	209
IV.50	Evolution de $\Phi_{sol}$ pour $t \in [0, 3.9s]$ : cas $T_f = 2000K$ , béton silico-calcaire.. . . .	210
IV.51	Evolution de $\Phi_{sol}$ pour $t \in [0, 4s]$ : cas $T_f = 2000K$ , béton siliceux. . . . .	211
IV.52	Champ de vitesse dans le cas des bétons silico-calcaire et siliceux. . . . .	212
IV.53	Vitesse moyenne d'ablation (en $mm.s^{-1}$ ) . . . . .	213
IV.54	Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9s]$ : béton silico-calcaire, $d \sim 70mm$ . . . . .	214
IV.55	Evolution de la densité pour $t \in [0, 4s]$ : béton siliceux, $d \sim 70mm$ . . . . .	215
IV.56	Evolution de $\Phi_{sol}$ pour $t \in [0, 4s]$ : béton silico-calcaire, $d \sim 70mm$ . . . . .	216
IV.57	Evolution de $\Phi_{sol}$ pour $t \in [0, 4s]$ : béton siliceux, $d \sim 70mm$ . . . . .	217
IV.58	Champ de vitesse dans le cas des bétons silico-calcaire et siliceux. . . . .	218
IV.59	Vitesse moyenne d'ablation (en $mm.s^{-1}$ ) . . . . .	219
IV.60	Configurations horizontale et verticale de la structure de la couche limite . . . . .	221
A.1	Décomposition de domaine au voisinage de l'interface . . . . .	233



# Liste des tableaux

II.1	Summary of physical parameters used for all numerical experiments . . . . .	43
II.2	Average Nusselt number : smooth case <i>vs.</i> rough case for $10^3 \leq \text{Ra}_L \leq 10^8$ . . . . .	49
II.3	Position of the effective surface $\Gamma_\delta$ . . . . .	55
II.4	Degree of freedoms (DOFs) involved in the numerical experiments. . . . .	55
II.5	Average Nusselt number : rough case <i>vs.</i> effective cases for $10^3 \leq \text{Ra}_L \leq 10^8$ . . . . .	56
II.6	Relative percentage error observed between $\langle \text{Nu}_r \rangle$ and $\langle \text{Nu}_{eff} \rangle$ . . . . .	56
III.1	Discrétisations possibles du terme non-linéaire $W'_i(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ . . . . .	94
III.2	Propriétés physiques : problème d'instabilités de Rayleigh-Taylor. . . . .	108
III.3	Paramètres numériques : problème d'instabilités de Rayleigh-Taylor . . . . .	111
III.4	Propriétés physiques : traitement numérique des conditions aux limites de sorties . . . . .	112
III.5	Paramètres numériques : traitement numérique des conditions aux limites de sorties. . . . .	113
III.6	Propriétés physiques : test de Laplace compositionnel . . . . .	118
III.7	Paramètres numériques : test de Laplace compositionnel. . . . .	119
III.8	Propriétés physiques : montée de bulle dans un milieu semi-infini. . . . .	120
III.9	Paramètres numériques : montée de bulle dans un milieu semi-infini . . . . .	123
III.10	Propriétés physique du système air-eau à 20°C. . . . .	124
III.11	Paramètres numériques : injection de bulles dans un milieu semi-infini. . . . .	125
III.12	Volume de gaz après le détachement de la bulle. . . . .	125
III.13	Propriétés physiques du calcul de référence diphasique compositionnel . . . . .	129
III.14	Paramètres numériques utilisés pour les calculs diphasiques compositionnels . . . . .	130
IV.1	Paramètres numériques utilisés pour l'ensemble des calculs de la section (IV.1) . . . . .	144
IV.2	Propriétés thermo-physiques du mélange . . . . .	145
IV.3	Composition des matériaux. . . . .	155
IV.4	Propriétés thermo-physiques des matériaux. . . . .	155
IV.5	Propriétés thermo-physiques du gaz. . . . .	195
IV.6	Tensions de surface des principaux constituants . . . . .	196
IV.7	Paramètres numériques utilisés pour l'ensemble des calculs de la section (IV.1) . . . . .	198



# Chapitre I

## Introduction générale

Devant la puissance croissante des calculateurs, les méthodes de simulation numérique directe se sont considérablement développées au cours de ces dernières années. Si elles restent encore généralement limitées à une classe réduite d'écoulements caractérisés, par exemple, par des nombres de Reynolds modérés pour les problèmes turbulents ou un nombre limité d'interfaces pour les problèmes multiphasiques, elles permettent d'obtenir des informations difficilement accessibles par l'expérience. Elles permettent d'avoir accès à la structure locale de l'écoulement et contribuent ainsi à une meilleure compréhension des phénomènes à la petite échelle. Les outils de simulation numérique directe sont ainsi de plus en plus utilisés pour venir renseigner les outils de simulation aux échelles de description supérieures mis en oeuvre pour les applications industrielles, par exemple les modèles RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) pour les problèmes turbulents ou les modèles bi-fluides pour les problèmes diphasiques.

Les difficultés associées aux modèles moyennés sont bien connues et concernent non seulement la fermeture des différents termes macroscopiques, comme les corrélations vitesse-température pour les problèmes turbulents ou les contributions de la force de traînée macroscopique pour les problèmes diphasiques, mais également le problème de la construction de conditions aux limites macroscopiques ou lois de parois. La première problématique a fait l'objet de nombreux travaux dans le contexte des écoulements turbulents selon une approche par simulation directe et une approche similaire commence également à être suivie pour les écoulements diphasiques. La deuxième problématique associée à la construction de lois de parois a essentiellement été abordée pour des problèmes d'écoulements turbulents sur parois lisses ou rugueuses et connaît un regain d'intérêt d'un point de vue théorique pour des problèmes d'écoulements laminaires sur des surfaces hétérogènes (rugosités, matériaux composites, ...).

Ce travail de thèse s'inscrit dans cette problématique générale de description et de modélisation multi-échelle et se propose de contribuer à la description des échanges de masse et de chaleur entre un fluide à haute température et un béton.

Dans la première partie de ce chapitre (*cf.* (I.1)), nous précisons le contexte nucléaire de ce travail de thèse qui concerne les études de sûreté menées sur les accidents graves de réacteur à eau sous pression et, plus particulièrement, la problématique de l'interaction corium-béton. Après avoir décrit les principaux phénomènes potentiellement mis en jeu à l'interface du corium et du béton (*cf.* (I.2)), nous présentons dans une troisième partie (*cf.* (I.3)) une revue bibliographique des principaux modèles d'échanges proposés pour les codes d'évaluation réacteur. Cette présentation nous permet d'évoquer les différentes questions posées par ces modèles ainsi que les limites et les difficultés actuelles qui justifient la démarche entreprise dans ce travail de thèse. Nous présentons ensuite (*cf.* (I.4)) le contexte général dans lequel s'inscrit ce travail qui correspond à une description et une modélisation multi-échelle des échanges, c'est-à-dire de l'échelle locale jusqu'à l'échelle du code d'évaluation réacteur. Cela nous permet de préciser les deux contributions spécifiques de ce



travail qui concernent, d'une part, la construction de conditions aux limites effectives ou lois de paroi et, d'autre part, la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation entre le corium et le béton. A cet effet, nous présentons les caractéristiques des écoulements étudiés dans ce travail ainsi que le choix d'une méthode. Enfin, nous terminons ce chapitre par les objectifs de notre étude (*cf.* (I.5)).

## I.1 Problématique du corium hors-cuve

Ce travail s'inscrit dans le cadre des études et des analyses de sûreté menées sur les accidents graves de réacteurs à eau sous pression (REP) actuels ou ceux de nouvelle génération de type EPR (European Pressurized Reactor). Un des scénarios possibles est la perte de réfrigérant dans

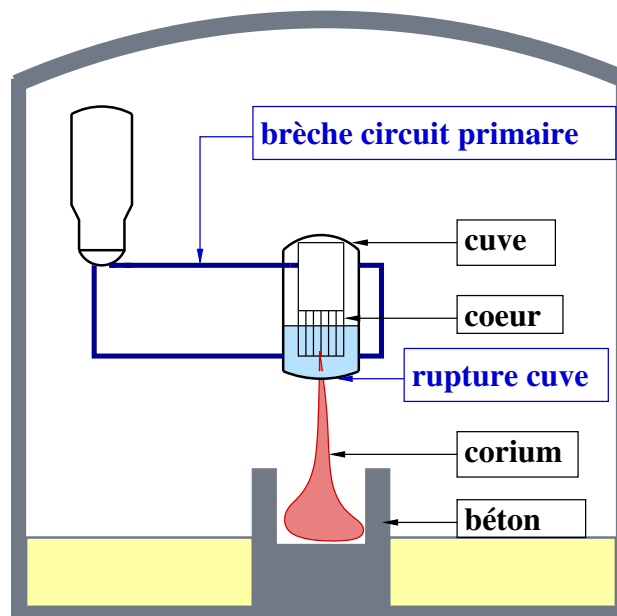


FIG. I.1: Schéma simplifié d'un scénario d'accident grave aboutissant à l'interaction corium-béton (cas des REP)

le circuit primaire provenant, par exemple, d'une brèche ou du défaut d'une pompe (*cf.* Fig.I.1). Dans ces conditions, si rien n'est fait, le cœur du réacteur peut être dénoyé et la température augmente sensiblement en raison de la puissance résiduelle générée par les réactions de fissions des noyaux d'uranium. Dès 1073K, le gainage en zirconium (Zr) des crayons de combustibles constituant le cœur du réacteur est oxydé en zircone ( $\text{ZrO}_2$ ) par la vapeur d'eau. Les parties non oxydées commencent quant à elles à fondre dès 2073K et rentrent alors en contact avec le combustible constitué de dioxyde d'uranium ( $\text{UO}_2$ ) pour former un système binaire  $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ . Enfin, le combustible commence à fondre aux alentours de 3073K. Il se forme alors un mélange de matériaux fondus appelé *corium* constitué principalement de dioxyde d'uranium, de zircone ainsi que des produits de fusion des différentes structures en acier dont les principaux constituants sont le chrome (Cr), le nickel (Ni) et le fer (Fe). Ce mélange à haute température ( $\sim 2700\text{K}$ ) se relocalise vers le fond de cuve et peut entraîner plus ou moins rapidement la percée de la cuve par des contraintes thermiques (érosion thermique) et/ou mécaniques (*e.g.* fluage, rupture plastique, ...). Dans ces conditions, le corium se relocalise dans le puits de cuve en béton qui constitue l'une des dernières barrières de confinement du réacteur (*cf.* Fig.I.1). Le béton se décompose alors en produits liquides ( $\text{CaO}$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , ...) et en produits gazeux tels que la vapeur d'eau ( $\text{H}_2\text{O}$ )

et le dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ). Les constituants métalliques du bain de corium sont ensuite oxydés par le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau. Il se produit alors du monoxyde de carbone ( $\text{CO}$ ) et du dihydrogène ( $\text{H}_2$ ) qui, suite à leur dégagement, contribuent au risque de pressurisation de l'enceinte. La plupart de ces réactions d'oxydation étant fortement exothermiques [138], elles contribuent donc également à la production de chaleur au sein du bain de corium.

Cette étape de l'accident est appelée *interaction corium-béton* (ICB). Elle constitue l'un des enjeux majeurs des analyses de sûreté pour les réacteurs à eau sous pression du parc nucléaire actuel du fait de la perte de confinement et des éventuels rejets dans l'environnement qu'entraînerait une percée du radier. Pour les réacteurs de nouvelle génération de type EPR, la problématique de l'interaction corium-béton constitue également un enjeu majeur vis-à-vis des rôles du récupérateur et de la chambre d'étalement. Ce travail de thèse s'inscrit dans ce contexte et se propose de contribuer à la modélisation des échanges de masse et de chaleur dans le cadre de la problématique de l'interaction corium-béton.

## I.2 Phénoménologie

L'interaction corium-béton se caractérise dans un premier temps par une étape transitoire associée au déversement et à l'impact de jets de corium sur le béton (*e.g.* choc thermique, phénomène de *spallation* [55], ...) qui peuvent altérer significativement la structure interne et externe du béton en provoquant la formation de fissures et/ou de fractures [66]. Dans ce travail, nous n'apportons pas de contribution à l'étude de ces phénomènes transitoires mais nous nous intéressons plus particulièrement à l'interaction proprement dite après le déversement total du corium sur le béton. Dans ce cas, on a l'habitude de distinguer deux configurations du bain de corium (*cf.* Fig.I.2) : une configuration dite *homogène* où le bain de corium est supposé être "macroscopiquement" bien mélangé par les gaz de décomposition du béton et une configuration dite *stratifiée* où il est communément admis que les principaux constituants du corium se séparent selon deux phases, l'une majoritairement oxyde et l'autre majoritairement métallique.

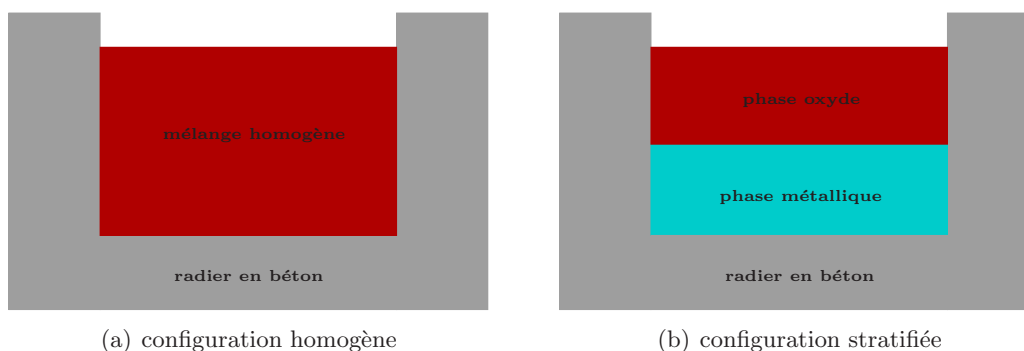


FIG. I.2: Configurations envisagées pour le bain de corium lors de l'interaction corium-béton.

Dans le cadre de ce travail, on s'intéresse à la phase associée à une configuration dite homogène du bain de corium et on renvoie le lecteur intéressé aux travaux de Lapuerta [106] pour une étude des échanges entre les deux couches d'une configuration stratifiée. Même dans cette configuration, on s'attend à des comportements différents en fonction du type de béton mis en jeu lors de l'interaction. Il existe en effet plusieurs types de béton et leur comportement à haute température dépend essentiellement de la nature des agrégats minéraux qui les composent.

Le béton est un matériau composite principalement constitué d'agrégats minéraux (*e.g.* la silice  $\text{SiO}_2$ , le calcaire  $\text{CaCO}_3$ , ...) liés entre eux hydrauliquement par une matrice de pâte de ciment

durcie (*i.e.* le mortier). Cette pâte hautement poreuse est principalement composée d'alumine ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), d'hématite ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), et de chaux vive ( $\text{CaO}$ ), et nécessite une grande quantité d'eau, appelée eau de gâchage, pour lier les agrégats entre eux. On distingue alors deux types d'eau : l'eau liée chimiquement et l'eau évaporable. Cette dernière est retenue mécaniquement entre les agrégats ou dans le ciment tandis que la quantité d'eau liée est déduite de la différence entre l'eau de gâchage (*i.e.* l'apport initial) et l'eau évaporable. Généralement, la proportion en eau dans le ciment est de 70% d'eau libre et 30% d'eau liée [36]. Les bétons utilisés dans la conception des radiers des REP du parc nucléaire Français actuel peuvent être classés en trois principales catégories :

1. les bétons de type siliceux : majoritairement riche en agrégats de silice ( $\text{SiO}_2$ ),
2. les bétons de type calcaire : majoritairement riche en agrégats de calcaire ( $\text{CaCO}_3$ ),
3. les bétons de type silico-calcaire : contenant à la fois des agrégats de silice et de calcaire.

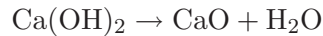
Pour les réacteurs de nouvelle génération de type EPR, le béton utilisé pour la conception du récupérateur de corium est un béton sacrificiel de type silico-calcaire dans lequel les agrégats de calcaire ont été remplacés par des agrégats de clinker (*i.e.* du silicate de calcium calciné) [60].

Comme nous l'avons évoqué précédemment, le comportement de ces bétons lors de l'interaction corium-béton dépend essentiellement des agrégats qui les composent, à savoir la silice, le calcaire et le clinker. Dans ce travail, même si nous ne nous intéressons pas aux hétérogénéités du béton, existantes ou engendrées lors de la première phase de l'interaction (*e.g.* fracture, ...), nous trouvons néanmoins intéressant de présenter certaines propriétés du béton lorsqu'il est soumis à de hautes températures. Cela nous permettra ensuite de souligner le rôle des différents agrégats au cours de l'interaction corium-béton. Lorsqu'un béton est soumis à de hautes températures, on distingue principalement les étapes suivantes [13] :

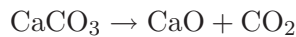
~ 373K : évaporation de l'eau libre contenue dans le ciment et les agrégats

~ 453K : déshydratation du ciment

~ 773K : décomposition des hydrates de calcium



~ 973K – 1173K : réaction de décarbonatation des agrégats de calcaire



~ 1423K – 1473K : début de la fusion du ciment et des agrégats de calcaire

~ 1973K : début de la fusion des agrégats de silice

La décomposition du béton entraîne donc le relâchement d'espèces gazeuses telles que la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone issues respectivement des différentes étapes de déshydratation de la matrice de ciment et de la réaction de décarbonatation des agrégats de calcaires. Les bétons de types calcaire ou silico-calcaire sont plus riches en carbonates que les bétons siliceux. Par conséquent, lors de l'interaction corium-béton, ils vont relâcher une quantité nettement plus importante de dioxyde de carbone. En outre, comme le clinker ne contient pas de carbonates, le béton sacrificiel utilisé dans la conception du récupérateur d'EPR relâche beaucoup moins de dioxyde de carbone que les bétons de type calcaire ou silico-calcaire et se rapproche ainsi sur ce point des bétons de type siliceux. On rappelle également que l'étape transitoire associée au déversement du corium est susceptible de générer un réseau de fractures au sein du béton qui constitue alors des chemins préférentiels pour les gaz de décomposition. Ainsi, la distribution des sites de relâchement de gaz

dépend non seulement du type de béton mais aussi des fractures naturelles ou induites par la phase de déversement.

L'érosion thermique du béton provoque également sa décomposition en produits liquides ( $\text{CaO}$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , ...) miscibles avec les oxydes constituant le corium. Le mélange de béton fondu étant moins dense que le corium, celui-ci peut être éjecté partiellement ou totalement dans le bain de corium sous l'effet des forces de flottaison (instabilités de Rayleigh-Taylor). Les structures convectives associées contribuent ainsi au mélange compositionnel entre le corium et le béton. Les agrégats de silice sont susceptibles de jouer un rôle important sur les caractéristiques de mélange. En effet, la température des agrégats de silice étant bien supérieure à celle du mortier, ceux-ci peuvent éventuellement être éjectés (ablation mécanique) [94] et contribuer à une augmentation de la viscosité dans le bain (effet de la silice) ainsi qu'au voisinage du front d'ablation (effet des particules solides). Dans le cas contraire, en l'absence d'ablation mécanique, les agrégats de silice fondus ont pour effet d'augmenter fortement la viscosité au voisinage du front d'ablation. D'autres mécanismes sont susceptibles d'altérer le mélange compositionnel associé aux instabilités de Rayleigh-Taylor et la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation. Le relâchement des gaz de décomposition du béton peut par exemple conduire à la formation d'un film de gaz entre le béton fondu et le béton dégradé mais aussi provoquer l'entraînement partiel ou total du béton fondu dans le corium et donc contribuer au mélange compositionnel entre le corium et le béton. Enfin, la présence de *zones pâteuses* ou de croûtes, principalement dues au caractère réfractaire du corium, peut également venir modifier les structures d'écoulement au voisinage du front d'ablation. Le diagramme de phase associé au *pseudo-binaire* corium-béton présenté sur la figure (I.3) montre des différences importantes entre les températures de liquidus et de solidus, ce qui suggère effectivement la présence de *zones pâteuses* au voisinage du front d'ablation. Signalons ici que le mélange constitué par les différentes espèces constituant le corium et les produits de décomposition liquides du béton est communément assimilé à un *pseudo-binaire*, c'est-à-dire à un mélange de deux "corps purs" correspondant ici au corium et au béton, pour sa caractérisation thermodynamique [40] et les applications réacteurs.

### I.3 Description des échanges à l'interface du corium et du béton

Les outils numériques utilisés dans la gestion de crise permettant, d'une part, de simuler la phénoménologie de l'interaction corium-béton et, d'autre part, d'estimer le temps de percement du radier sont des *codes à zones*. On cite en particulier le code d'évaluation réacteur MEDICIS (Model of Erosion Due to Interaction of Corium with basemat Substrate) [42] qui est le module dédié à l'ICB du code ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) [147] développé par l'IRSN et son homologue allemand GRS (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH). De tels outils numériques sont basés sur une description à grande échelle des échanges de masse et de chaleur avec deux types de configuration du bain de corium (*cf.* Fig.I.2) : d'une part une configuration dite *homogène* dans laquelle le bain est assimilé à un mélange principalement constitué d'oxyde et, d'autre part, une configuration dite *stratifiée* avec une couche oxyde et une couche métallique. Comme nous l'avons précisé précédemment, on s'intéresse dans ce travail à la phase "bien mélangée" et donc à la modélisation des échanges entre ce mélange et le béton.

Le flux de chaleur à l'interface du corium et du béton  $q$  est généralement calculé par l'expression suivante [142]

$$q = h (T_c - T_i) \quad (\text{I.1})$$

où  $T_c$  et  $T_i$  désignent respectivement la température moyenne du bain de corium et une température moyenne d'interface. Selon les modèles,  $T_i$  peut être assimilée à la température de liquidus du pseudo-binaire corium-béton (*e.g.* [136]), à une température de décomposition du béton (*e.g.* [27]) ou encore à une température intermédiaire entre la température de solidus et de liquidus (*e.g.* [42]).

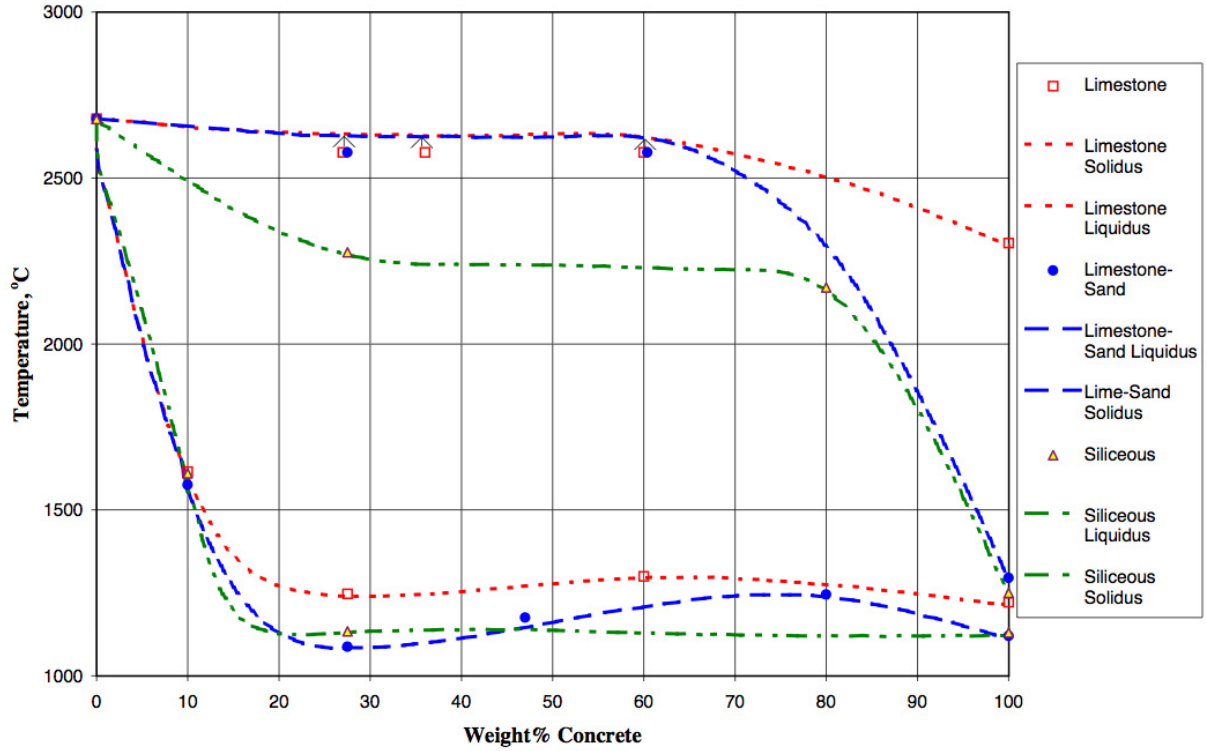


FIG. I.3: Diagramme de phases pseudo-binaires pour les mélanges  $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ -béton (calcaire (*cf.* limestone), siliceux (*cf.* siliceous), silico-calcaire (*cf.* limestone-sand)) [129].

Cette température d'interface est donc un paramètre de modélisation dont la définition dépend principalement d'une représentation à priori connue de l'interface entre le corium et le béton. Dans (I.1),  $h$  désigne un coefficient de transfert de chaleur à l'échelle du code d'évaluation réacteur pour lequel de nombreux modèles ont été proposés.

Devant la complexité et le couplage des phénomènes potentiellement mis en jeu au voisinage du front d'ablation, la démarche habituellement retenue pour la modélisation des échanges consiste dans un premier temps à décrire les échanges associés à une partie des phénomènes, principalement les échanges associés au dégazage du béton et ceux associés aux effets compositionnels. Les modèles d'échange des codes d'évaluation réacteur sont ensuite construits sur la base d'une structure a priori connue de la couche limite à l'échelle du front d'ablation en privilégiant un phénomène particulier ou en tentant d'intégrer l'ensemble des phénomènes.

Les modèles d'échange sont présentés selon cette démarche et nous commençons par rappeler les principaux modèles proposés visant à décrire les échanges associés à une partie des phénomènes potentiellement mis en jeu. Les phénomènes considérés sont, d'une part, les échanges convectifs associés au dégazage du béton pour lesquels il existe une littérature abondante en raison des nombreuses problématiques associées à l'ébullition nucléée et, d'autre part, les échanges associés à la convection compositionnelle pour lesquels la littérature est principalement issue des travaux menés en volcanologie. Nous présentons ensuite les modèles d'échange dits globaux tentant d'intégrer l'ensemble des phénomènes et qui, en pratique, sont ceux utilisés dans les codes d'évaluation réacteur. Enfin, nous terminons cette partie par une discussion sur les questions posées par ces différents modèles.

### I.3.1 Modèles d'échange associés au dégazage

Nous avons vu précédemment qu'au cours de l'interaction corium-béton la décomposition du béton provoquait un important dégagement gazeux au voisinage de l'interface.

De nombreux travaux expérimentaux simulant ce phénomène ont été réalisés pour étudier le transfert de chaleur entre un liquide à haute température et une plaque poreuse (ou percolée) traversée par du gaz. On cite par exemple les travaux de Kutateladze [103], Kutateladze et Malenkov [104], Duignan *et al.* [49] ou encore ceux de Bonnet réalisés dans le cadre du programme expérimental BALI [19]. Dans ces expériences, de nombreux paramètres ont été étudiés comme par exemple la viscosité du liquide et la vitesse superficielle du gaz. Les principaux résultats de ces travaux montrent qu'une augmentation de la viscosité du liquide entraîne une diminution du coefficient de transfert de chaleur tandis que ce dernier augmente lorsque la vitesse superficielle du gaz augmente. Certains auteurs (*e.g.* [54] pour une revue) ont établi notamment sur la base de résultats expérimentaux des corrélations reliant le nombre de Nusselt  $Nu$  (*i.e.* version adimensionnée du coefficient de transfert de chaleur) à d'autres nombres sans dimension tels que le nombre de Prandtl  $Pr$ , le nombre de Reynolds  $Re$  ou encore le nombre de Froude  $Fr$ . Cependant, comme le souligne Tourniaire [142], l'extrapolation de ces corrélations aux cas réacteurs caractérisés par des fluides de fortes viscosité reste à démontrer.

D'autres auteurs ont construit des modèles d'échanges de chaleur dits à *interface renouvelable* (ou "surface renewal models" pour la terminologie anglo-saxonne). Ces modèles supposent que le transfert de chaleur est principalement contrôlé par l'agitation locale des bulles qui viennent périodiquement perturber l'interface liquide-solide (*e.g.* corium-béton solide) et ainsi mettre en contact le solide froid avec le liquide chaud pendant un certain temps  $\tau$  appelé temps de renouvellement d'interface. Lors de chaque contact, un phénomène de diffusion de chaleur transitoire prend place à l'interface du liquide et du solide. Ce phénomène peut être décrit par un problème instationnaire de diffusion de chaleur pour un système diphasique stratifié (*e.g.* [142]). La résolution de ce problème (*e.g.* [34]) permet de déterminer le flux de chaleur moyen à l'interface liquide-solide  $\bar{q}$  au cours de chaque contact. Il s'écrit en effet

$$q = h (T_\ell - T_i) \quad (I.2)$$

où  $T_\ell$ ,  $T_i$  et  $h$  désignent respectivement la température du liquide chaud, la température d'interface entre le liquide et le solide, et le coefficient de transfert de chaleur. Ce dernier est défini en fonction du temps caractéristique de renouvellement d'interface  $\tau$  sous la forme

$$h = 2 \frac{\beta_\ell}{\sqrt{\tau\pi}} \quad (I.3)$$

où  $\beta_\ell$  désigne l'effusivité thermique du béton. Toute la difficulté réside alors dans la détermination de ce temps caractéristique  $\tau$ . Une estimation standard de ce temps caractéristique est donnée par le rapport entre le diamètre de bulle  $d_b$  et la vitesse superficielle du gaz  $j_g$  (*e.g.* [142]). Cette approche dimensionnelle du temps de renouvellement d'interface reste intuitive mais certains auteurs ont tenté d'enrichir cette approche avec des hypothèses sur les propriétés physiques du mécanisme de perturbation de l'interface. A cet effet et pour illustrer nos propos, on se propose ici de clore cette première partie en présentant les modèles de Deckwert [47] et de Lee *et al.* [109] qui sont basés sur une hypothèse similaire de perturbation de l'interface due au bullage et qui conduisent à deux estimations différentes du temps de renouvellement d'interface. Signalons que bien que le modèle de Deckwert ait été initialement introduit pour la détermination d'un coefficient de transfert de chaleur entre une paroi imperméable et un bain à bulles, ce modèle est également appliqué dans le cas de plaques poreuses traversées par du gaz [142].



**Modèle de Deckwert [47]**

Dans le cadre d'une étude du mécanisme de transfert de chaleur dans une colonne à bulles, Deckwert considère que des tourbillons circulent du volume de fluide à la paroi et réciproquement. L'agitation des bulles entre le bain de liquide et une paroi suggère un processus de diffusion pour le transfert de chaleur. Son étude du coefficient de transfert de chaleur est également basée sur la résolution d'un problème instationnaire de diffusion de chaleur pour un système diphasique stratifié. Il détermine ainsi le flux de chaleur moyen en fonction d'un temps caractéristique  $\tau$  qui dans ce cas correspond au temps de contact des tourbillons avec la paroi. Deckwert propose alors d'utiliser la théorie de la turbulence isotrope de Kolmogorov pour estimer  $\tau$ . Dans un écoulement turbulent, de grands tourbillons résultants de perturbations sont formés et contiennent la majorité de l'énergie. Toutefois, ils ne contribuent pas à la dissipation d'énergie visqueuse  $\varepsilon$ . Cette dissipation est effectuée par les petits tourbillons générés par le mouvement des grands tourbillons. Deux grandeurs caractéristiques dépendant uniquement de la viscosité cinématique  $\eta$  et de la dissipation d'énergie visqueuse  $\varepsilon$  sont corrélées à ces petits tourbillons :

1. la longueur caractéristique des petits tourbillons  $\lambda$ ,

$$\lambda = \left( \frac{\eta^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (\text{I.4})$$

2. la vitesse caractéristique des petits tourbillons,

$$v = (\eta\varepsilon)^{\frac{1}{4}} \quad (\text{I.5})$$

Deckwert suggère que le bullage considéré dans son étude crée des petits tourbillons s'impactant sur la paroi. Sous cette hypothèse, il estime que le temps de contact des particules fluides avec la paroi est donné par

$$\tau = \frac{\lambda}{v} \quad (\text{I.6})$$

De cette manière, le coefficient de transfert de chaleur  $h$  est définie en fonction de l'énergie de dissipation visqueuse. Cette dernière inconnue est estimée par Deckwert comme étant le produit de la vitesse superficielle du gaz  $j_g$  et de l'accélération gravitationnelle  $g$ .

**Modèle de Lee *et al.* [109]**

Lee *et al.* développent un modèle à interface renouvelable entre le béton et un bain de corium. Ce modèle suggère que l'interface entre le corium et le béton est perturbée par le passage d'une bulle de gaz qui détruit le gradient de température entre les deux phases (*i.e.* corium-béton solide). Après le passage de cette bulle, il existe un temps de contact entre le bain de corium et le béton. Le temps caractéristique  $\tau$  dans le modèle de Lee *et al.* est défini comme le temps existant entre le passage de deux bulles successives. Afin d'estimer ce temps caractéristique, Lee *et al.* font les hypothèses suivantes :

1. la période entre chaque passage de bulle peut être identifiée comme étant le temps de contact de la bulle avec la surface en béton (*i.e.* le temps de détachement)
2. le taux de croissance d'une bulle est proportionnel au produit de la vitesse superficielle du gaz  $j_g$  et d'une surface d'une section de béton donnée comme étant le carré de la constante de Laplace  $A$ ,
3. le rayon de départ de la bulle est donné par un équilibre entre les forces de flottaison et de tension de surface,

4. la vitesse superficielle du gaz  $j_g$  est reliée au flux de chaleur moyen  $q$  par la relation

$$\rho_g L j_g = q = h (T_{\text{corium}} - T_f) \quad (\text{I.7})$$

où  $\rho_g$ ,  $L$  et  $T_f$  désignent respectivement la masse volumique du gaz, la chaleur effective de fusion du béton incluant la chaleur latente du béton solide et la température de fusion du béton.

Sous ces hypothèses, la forme du temps caractéristique proposée par Lee *et al.* est donnée par

$$\tau \sim \frac{A \rho_g L}{q} \quad (\text{I.8})$$

Les derniers modèles d'échanges de chaleur présentés dans cette partie sont basés sur un concept d'interface renouvelable faisant l'hypothèse d'une perturbation périodique de l'interface liquide-solide par le bullage. Cette approche s'applique de manière plus générale à d'autres types de systèmes multiphasiques et/ou multiconstituants pour lesquels le renouvellement d'interface est régi par des perturbations autres que le bullage. A titre d'exemple, nous pourrions voir dans la prochaine partie que, pour un système compositionnel liquide-liquide hydrodynamiquement instable, une instabilité de Rayleigh-Taylor peut être considérée comme la perturbation régissant le renouvellement d'interface. Nous verrons en outre dans la dernière partie de cette section que certains modèles d'échanges globaux peuvent également être assimilés à des modèles à interface renouvelable.

### I.3.2 Modèles d'échange associés à la convection compositionnelle

L'érosion thermique du béton lors de l'interaction corium-béton entraîne la décomposition du béton non seulement en produits gazeux mais aussi en produits liquides (ou béton fondu) présentant la particularité d'être totalement miscibles avec les espèces oxyde constituant le corium. Comme le souligne Epstein [53], du fait de l'absence d'effets capillaires entre le corium et le béton, le contraste de densité existant entre ces deux fluides est suffisant pour produire sous l'effet des forces de flottaison un mouvement de convection compositionnelle intense qui peut avoir un impact significatif sur la cinétique d'ablation.

D'après Epstein [53], une des premières études théoriques portant sur le sujet a été proposée par Cheung [39]. Il s'agit d'un modèle pour la vitesse d'ablation ayant été dérivé dans le cadre de l'approximation de Boussinesq. Epstein souligne néanmoins que ce modèle n'est valable que pour des nombres de Prandtl  $Pr$  de l'ordre de l'unité. Il est donc difficilement extrapolable au cas de l'interaction corium-béton puisque le nombre de Prandtl  $Pr$  pour le béton est compris entre  $10^3$  et  $10^4$ . Le premier modèle de transfert de chaleur semble avoir été proposé par Catton [35]. Ce modèle est basé sur l'hypothèse de l'existence d'une fine couche de substrat fondu entre le liquide et le substrat solide dont le comportement est régi par un mécanisme d'instabilité de Rayleigh-Taylor avec tension de surface nulle. Il prédit non seulement que le transfert de chaleur dépend du contraste de densité entre le liquide et le substrat fondu mais aussi qu'il est indépendant de la différence de température entre ces deux mêmes fluides.

Dans le domaine de la géophysique, on peut citer les travaux de Kerr [97] réalisés dans le cadre de l'étude du comportement des magmas basaltiques dans la croûte terrestre et repris par Carenini *et al.* [31, 32] pour l'interprétation de certains essais VULCANO. De notre point de vue, un des intérêts de ce modèle vis-à-vis de nos applications réacteur est qu'il tient compte non seulement du contraste de densité mais aussi du contraste de viscosité. On se propose ici de reprendre et de présenter dans ses grandes lignes la dérivation de ce modèle.



**Modèle d'échange proposé par Kerr [97]**

Le système physique considéré consiste en un système stratifié avec un liquide chaud de composition initiale  $C_f$  qui surplombe un substrat solide de composition initiale  $C_s$  (cf. Fig.I.4). La température initiale du solide est notée  $T_s$  et sa température d'ablation  $T_m$ .

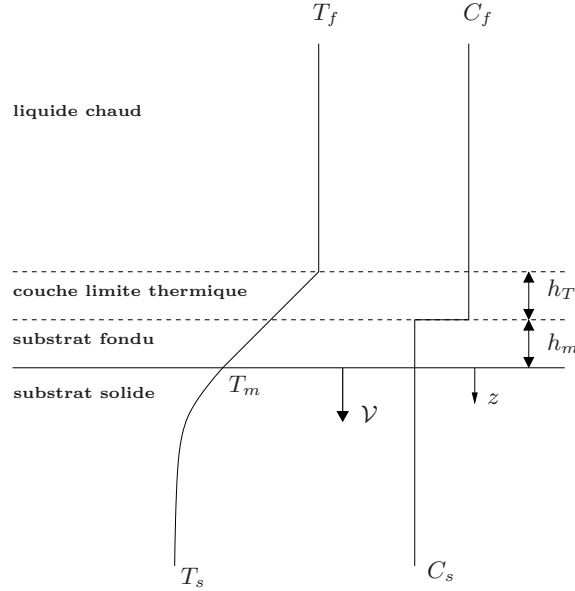


FIG. I.4: Représentation schématique de l'interface lors de l'ablation d'un substrat solide par un liquide à une vitesse constante  $\mathcal{V}$  : substrat solide, couche de substrat fondu d'épaisseur  $h_m$ , couche limite thermique d'épaisseur  $h_T$ , liquide chaud.

Pour dériver son modèle, Kerr fait les hypothèses suivantes :

1. le volume de liquide chaud est suffisamment important pour que ses propriétés physiques restent inchangées,
2. le solide est ablaté à une vitesse constante  $\mathcal{V}$ ,
3. l'interface entre le solide et le substrat fondu est plane,
4. les variations de température vis-à-vis des densités du liquide chaud et du substrat fondu sont négligeables par rapport aux variations de composition,
5. la diffusion compositionnelle est négligée devant la diffusion thermique (*i.e.*  $T_f \gg T_m$  et profil de composition "sharp" (cf. Fig.I.4)).

Comme nous l'avons évoqué précédemment, l'objectif est de déterminer la vitesse d'ablation  $\mathcal{V}$  lorsque la décomposition thermique du solide provoque un mouvement de convection compositionnelle vigoureux. Cela suppose donc que la densité du liquide chaud  $\varrho_f$  est nettement supérieure à celle du substrat fondu  $\varrho_m$ . Dans ces conditions, Kerr précise que l'on peut envisager la présence d'une couche de substrat fondu hydrodynamiquement instable qui croît progressivement et se détache périodiquement pour contribuer au mouvement convectif. Pour prédire l'épaisseur  $h_m$  de cette couche de substrat fondu avant la déstabilisation, Kerr suppose que le temps de croissance de cette couche (*i.e.*  $h_m/\mathcal{V}$ ) est comparable au temps de croissance exponentielle d'une instabilité gravitationnelle  $\tau$ . Ce dernier est estimé dans le cadre d'une analyse de stabilité linéaire de type Rayleigh-Taylor sous la forme

$$\tau \sim P \left( \frac{\eta_f}{\eta_m} \right) \frac{\eta_m}{gh_m (\varrho_f - \varrho_m)} \quad (\text{I.9})$$

où  $g$  et  $P(\eta_f/\eta_m)$  désignent respectivement l'accélération de la pesanteur et une certaine fonction qui dépend du contraste de viscosité entre les deux fluides  $\eta_f/\eta_m$  et qui converge asymptotiquement vers la valeur 6.222 lorsque  $\eta_f \ll \eta_m$ . Sous ces hypothèses, les estimateurs du temps de croissance de couche et de l'épaisseur de la couche de substrat fondu sont donnés par

$$\tau \sim \sqrt{\frac{P\eta_m}{g\mathcal{V}(\varrho_f - \varrho_m)}} \quad ; \quad h_m \sim \sqrt{\frac{P\mathcal{V}\eta_m}{g(\varrho_f - \varrho_m)}} \quad (\text{I.10})$$

Durant la croissance de la couche de substrat fondu (*i.e.* au cours du temps  $\tau$ ), une couche limite thermique prend place juste au dessus de la couche de substrat fondu dans laquelle la chaleur est transportée par diffusion (*cf.* Fig.I.4). L'épaisseur de cette couche  $h_T$  est déterminée à partir de l'expression de  $\tau$  sous la forme suivante

$$h_T \sim \sqrt{\kappa_f \tau} \sim \left( \frac{P\eta_m \kappa_f^2}{g\mathcal{V}(\varrho_f - \varrho_m)} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (\text{I.11})$$

où  $\kappa_f$  désigne la diffusivité thermique du liquide chaud. La couche de substrat fondu et la couche limite thermique sont traitées comme des résistances thermiques en séries et le flux de chaleur provenant du liquide chaud et traversant chacune de ces couches est estimé par

$$F_1 \sim \frac{1}{\left(\frac{h_T}{k_f}\right) + \left(\frac{h_m}{k_m}\right)} (T_f - T_m) \quad (\text{I.12})$$

où  $k_f$  et  $k_m$  désignent respectivement les conductivités thermiques du liquide et du substrat fondu. Par ailleurs, le flux de chaleur nécessaire à l'échauffement et à la fusion du substrat solide s'écrit

$$F_2 = \varrho_s \mathcal{V} (L + C_{p_s} (T_m - T_s)) \quad (\text{I.13})$$

où  $\varrho_s$ ,  $C_{p_s}$  et  $L$  désignent respectivement la densité, la chaleur spécifique et la chaleur de fusion du solide. Dans le cadre d'une approximation quasi-stationnaire, le flux de chaleur se conserve et on notera par la suite  $F = F_1 = F_2$ . Kerr introduit alors le nombre de Stefan  $St$  défini par

$$St = \frac{\varrho_s (L + C_{p_s} (T_m - T_s))}{\varrho_f C_{p_f} (T_f - T_m)} \quad (\text{I.14})$$

où  $C_{p_f}$  représente la chaleur spécifique du liquide chaud. A ce niveau, en remarquant d'une part que les relations (I.10) et (I.11) permettent d'écrire  $V/\kappa_f \sim h_m/h_T^2$  et d'autre part, que le nombre de Stefan s'exprime encore à partir de (I.12) et (I.13) sous la forme  $St \sim \kappa_f/Vh_T$ , le flux de chaleur défini par la relation (I.12) se réécrit comme suit

$$F = \frac{h_m}{h_T} (T_f - T_m) \left( 1 + \frac{k_f}{k_m St} \right)^{-1} \quad (\text{I.15})$$

Enfin, par conservation des flux de chaleur (*i.e.* (I.12)=(I.13)), on obtient une estimation de la vitesse d'ablation sous la forme suivante

$$\mathcal{V} = A \left( \frac{g(\varrho_f - \varrho_m) \kappa_f^2}{P\eta_m St^4} \right)^{\frac{1}{3}} \left( 1 + \frac{k_f}{k_m St} \right)^{-1} \quad (\text{I.16})$$

où  $A$  désigne une constante de proportionnalité. Cette estimation de la vitesse d'ablation reste valable pour des nombres de Stefan supérieurs ou de l'ordre du rapport  $k_f/k_m$  ce qui signifie que l'épaisseur de la couche limite thermique ne peut être négligée devant l'épaisseur de la couche de substrat fondu.

### I.3.3 Modèles d'échange globaux

Dans les deux précédentes parties, nous avons présenté les modèles d'échanges associés d'une part au dégazage du béton et d'autre part, aux effets compositionnels. Dans le cas général, nous avons vu précédemment que plusieurs phénomènes couplés étaient potentiellement mis en jeu au voisinage du front d'ablation à l'interface du corium et du béton. Pour prendre en compte ces phénomènes, certains auteurs ont construit des modèles d'échanges dits *globaux* en s'appuyant sur une structure à priori connue de l'interface entre le corium et le béton. Par exemple, voici sur la figure (I.5) une représentation de l'interface proposée par Bradley [27] décrivant certains phénomènes (*e.g.* couche de béton fondu, film de gaz, croûte de corium, ...) que les modèles d'échanges globaux considèrent. Parmi ces modèles, on cite par exemple le *gas film model* qui fait l'hypothèse de la présence d'un

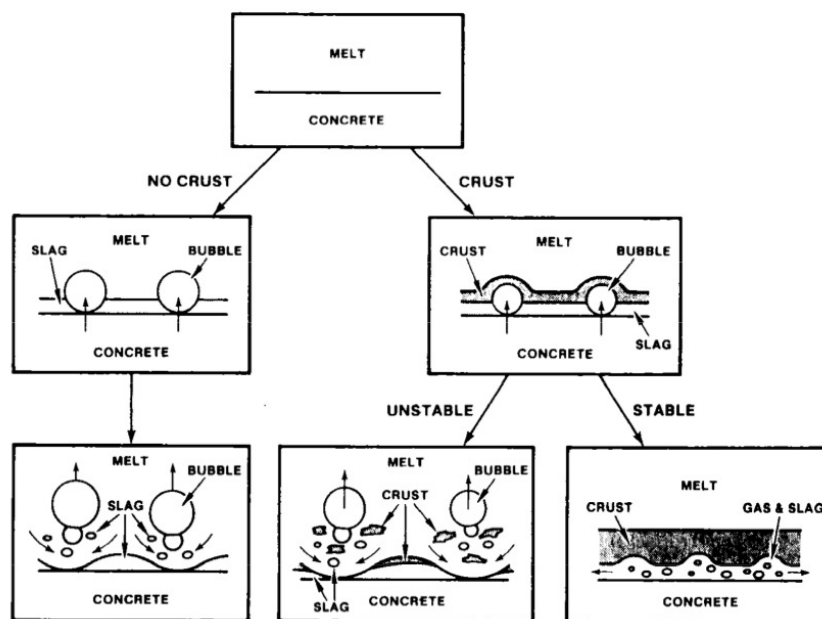


FIG. I.5: Représentation proposée par Bradley [27] des différents mécanismes potentiellement présents à l'interface du corium et du béton.

film de gaz stable, le *slag model* qui met en série une couche de béton fondu, une éventuelle croûte de corium et une couche de corium, ou encore le *post-freezing model* qui modélise l'impact d'une éventuelle croûte de corium. On se propose ici de présenter plus particulièrement dans ses grandes lignes un modèle proposé par Kao et Kazimi [95], à savoir le *periodic contact model*. De notre point de vue, cette présentation est intéressante pour deux raisons. La première raison est qu'elle permet d'illustrer simplement l'approche heuristique suivie par les modèles d'échanges globaux. La seconde raison est que le *periodic contact model* s'appuie également sur le concept d'interface renouvelable précédemment présenté. Il s'inscrit par conséquent dans la continuité des deux précédentes parties.

#### Periodic contact model proposé par Kao et Kazimi [95]

Kao et Kazimi supposent que le transfert de chaleur à l'interface du corium et du béton est piloté par les mécanismes suivants (*cf.* Fig.I.6) :

1. une agitation intense du bain de corium par les gaz de décomposition du béton,
2. l'existence d'une fine couche de béton fondu hydrodynamiquement instable,
3. la formation d'une croûte de corium.

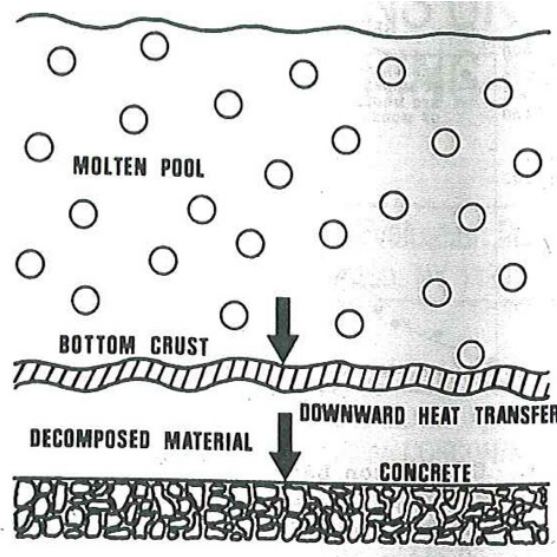


FIG. I.6: Représentation de l'interface entre le corium et le béton proposée par Kao et Kazimi [95]

Les effets associés à la formation d'une croûte de corium ne sont pas pris en compte dans le *periodic contact model*. Nous renvoyons le lecteur intéressé dans [95] pour un complément d'information sur le sujet.

Comme nous l'avons évoqué précédemment, le *periodic contact model* est un modèle à intervalle renouvelable s'appuyant sur l'hypothèse que du corium chaud rentre périodiquement en contact avec le béton froid sous l'effet du bullage qui déplace le béton fondu dans le bain de corium. Dans ce modèle, les effets liés au dégazage et au béton fondu sont simultanément pris en compte au travers d'un système diphasique liquide-liquide dont les propriétés thermiques sont calculées à partir de valeurs moyennes associées au gaz et au béton fondu.

Les flux de chaleur traversant les interfaces corium/béton fondu et béton fondu/béton solide sont respectivement définis par  $q_1$  et  $q_2$  sous la forme suivante

$$q_1 = h_1 (T_b - T_s) \zeta \quad (\text{I.17})$$

$$q_2 = h_2 (T_b - T_i) \quad (\text{I.18})$$

où  $T_b$ ,  $T_i$ ,  $T_s$ ,  $h_1$  et  $h_2$  désignent respectivement la température du corium, une température moyenne d'interface restant à préciser, la température du béton solide et deux coefficients de transferts de chaleur. Le coefficient  $\zeta$  permet de prendre en compte l'énergie nécessaire pour chauffer la couche de béton fondu au dessus de la température d'ablation. Il est donné par

$$\zeta = \frac{L + C_{pf} (T_i - T_s) / 3}{L} \quad (\text{I.19})$$

où  $L$ ,  $C_{pf}$  désignent la chaleur latente de fusion et la chaleur spécifique du béton. Dans le cadre d'une approximation quasi-stationnaire, le flux de chaleur se conserve à travers chaque couche de l'interface et on peut écrire une relation entre les coefficients de transferts de chaleur  $h_1$  et  $h_2$  sous la forme suivante

$$h_1 = h_2 \left( \frac{T_b - T_i}{T_b - T_s} \right) \zeta \quad (\text{I.20})$$

Par ailleurs, si l'on suppose que l'interface entre le bain de corium et le béton fondu est périodiquement perturbé par le passage d'une bulle de gaz, alors le flux de chaleur  $q_2$  s'écrit encore à partir

de (I.2) et (I.3) sous la forme

$$q_2 = 2 \frac{\beta_b}{\sqrt{\pi\tau}} (T_b - T_i) \quad (\text{I.21})$$

où  $\beta_b$  et  $\tau$  désignent respectivement l'effusivité thermique du corium et le temps de déstabilisation de l'interface. Ce dernier est défini de manière analogue à l'approche de Lee [109] (*cf.* (I.3.1)) comme étant le temps existant entre le passage de deux bulles successives. Il s'écrit à partir de la relation (I.8)

$$\tau \sim \frac{A \varrho_f L}{q_2 \zeta} \quad (\text{I.22})$$

où  $A$  et  $\varrho_f$  correspondent respectivement à la constante de Laplace et la densité du béton fondu. Désormais, en substituant l'expression (I.22) dans (I.21) puis en utilisant la définition (I.18), on obtient

$$h_2 = \frac{4\beta_b}{\pi A \varrho_f L} (T_b - T_i) \zeta \quad (\text{I.23})$$

Le coefficient de transfert de chaleur  $h_1$  donné par (I.20) s'écrit à partir de la relation (I.23) sous la forme

$$h_1 = \frac{4\beta_b (T_b - T_s)}{\pi A \varrho_f L} \left[ \left( \frac{T_b - T_i}{T_b - T_s} \right) \zeta \right]^2 \quad (\text{I.24})$$

Soit encore,

$$h_1 = \frac{4k_f C_{pf} (T_b - T_s)}{\pi A \beta_b L} \left[ \frac{\beta_b}{\beta_f} \left( \frac{T_b - T_i}{T_b - T_s} \right) \zeta \right]^2 \quad (\text{I.25})$$

où  $\beta_f$  et  $k_f$  désignent respectivement l'effusivité thermique et la conductivité thermique du béton fondu. Le coefficient de transfert de chaleur  $h_1$  entre le corium et le béton peut également s'exprimer sous forme adimensionnée à partir du nombre de Nusselt  $\text{Nu} = h_1 A / k_f$ . D'après (I.25), ce dernier s'écrit

$$\text{Nu} = C \left[ \frac{C_{pf} (T_b - T_s)}{L} \right] \gamma^2 \quad (\text{I.26})$$

où nous avons introduit

$$C = \frac{4}{\pi} \quad ; \quad \gamma = \frac{\beta_b}{\beta_f} \left( \frac{T_b - T_i}{T_b - T_s} \right) \zeta \quad (\text{I.27})$$

Il reste désormais à déterminer la température moyenne d'interface  $T_i$ . L'estimation proposée par Kao et Kazimi s'écrit

$$\frac{T_b - T_i}{T_b - T_s} = (1 - \zeta) \left( \frac{\beta_f}{\beta_b + \beta_f} \right) + \zeta \left( \frac{\beta_s}{\beta_b + \beta_s} \right) \quad (\text{I.28})$$

Il s'agit ici d'une combinaison de la température d'interface dans le cas où le corium est directement en contact avec le béton solide avec la température d'interface dans le cas où le corium est en contact avec la couche de béton fondu. De cette manière, le coefficient de transfert de chaleur donné par la relation (I.26) tient compte de la présence ou non d'une couche de béton fondu hydrodynamiquement instable.

Les modèles d'échanges globaux précédemment cités prennent en compte une certaine gamme de mécanismes physiques supplémentaires potentiellement présents à l'interface du corium et du béton mais supposent que les fluides mis en jeu sont non miscibles. A notre connaissance, seuls les travaux d'Epstein [53] prennent en compte les effets compositionnels entre le béton fondu et les oxydes constituant le corium. Epstein a en effet construit un modèle d'échange global en se

basant également sur une structure à priori connue de l'interface entre le corium et le béton faisant l'hypothèse de l'existence d'une couche de béton fondu entre un corium oxyde et un béton en décomposition (*cf.* Fig.I.7). En s'appuyant sur les travaux de Davenport et King [43] réalisés dans le cadre d'une étude sur la convection libre à haut nombre de Rayleigh  $Ra$ , Epstein suppose que cette couche de béton fondu est marginalement stable et que son épaisseur est donnée à partir du nombre de Rayleigh critique local (*i.e.* la valeur du nombre de Rayleigh à partir de laquelle l'instabilité hydrodynamique se déclenche). D'un point de vue des transferts de chaleur, la couche de béton fondu est traitée comme une résistance thermique en série avec les coefficient de transfert de chaleur convectifs associés, d'une part, au bullage et, d'autre part, au dégagement de plumes de béton fondu sous l'effet des forces de flottaison. Enfin, les mouvements convectifs induits dans le bain de corium sont décrit à l'aide de corrélations disponibles dans la littérature.

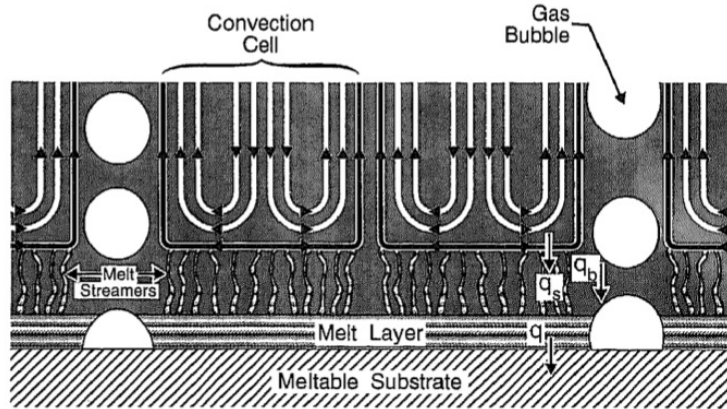


FIG. I.7: Représentation de l'interface entre le corium et le béton proposée par Epstein [53]

#### I.3.4 Discussion

Nous avons vu que de nombreux modèles d'échange de chaleur ont été proposés à l'échelle de description du code d'évaluation réacteur sur la base d'une structure a priori connue de la couche limite à l'échelle du front d'ablation (*e.g.* Fig.I.5, Fig.I.6, Fig.I.7). Ces modèles soulèvent de nombreuses questions tant d'un point de vue de la description adoptée de la couche limite que des aspects multi-échelle couplant les échanges au front d'ablation et l'écoulement dans le puits de cuve. Par ailleurs, même en admettant la validité des structures simples proposées, il reste à estimer quantitativement correctement les termes d'échanges.

Les nombreux travaux expérimentaux menés sur cette thématique en matériaux simulants ou prototypes (*cf.* [94] pour une revue) sont à des échelles globales et les informations concernant la structure de la couche limite sont actuellement très limitées. En conséquence, il apparaît difficile de déterminer la pertinence des différents modèles proposés à partir d'une certaine représentation de la couche limite. Par ailleurs, ces modèles heuristiques ne sont pas construits sur la base d'un lien clair entre les différentes échelles de description. En particulier, l'échelle macroscopique est ignorée et l'impact des structures cohérentes convectives à l'échelle du puits de cuve n'est pas prise en compte alors que ces structures sont potentiellement à l'origine des profils de cavité ablatée (ablation préférentiellement radiale) observés dans certaines expériences citées plus haut. Cette question est actuellement ouverte et fait l'objet du programme expérimental CLARA visant à estimer la distribution du flux de chaleur le long des parois d'une cavité parallélépipédique remplie d'eau et chauffée en volume. Les parois sont des plaques poreuses percolées par du gaz pour reproduire le dégazage du béton et sont maintenues à une température uniforme. En revanche, les effets compositionnels (instabilités de Rayleigh-Taylor, zone pâteuse, ...) ne sont pas actuellement



pris en compte dans le dispositif. Enfin, la plupart des modèles proposés se concentrent sur une partie des phénomènes mis en jeu (bullage, effets compositionnels, ...) et la modélisation de la résultante des échanges est généralement réalisée de manière *ad-hoc* au travers de termes correctifs. Ces termes sont souvent mal justifiés ou difficiles à estimer et, en pratique, il est souvent difficile de réaliser des calculs prédictifs.

## I.4 Stratégie de modélisation et description de l'étude

Devant les nombreuses questions posées par les modèles d'échange actuels, l'objectif principal de ce travail consiste à aborder le problème de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation par simulation numérique directe. L'intérêt d'une telle approche est double. Elle permet, d'une part, d'avoir accès à la structure de la couche limite difficilement observable par l'expérience et, ainsi, d'avoir une meilleure connaissance des mécanismes physiques à cette échelle et de mener une analyse critique des différents modèles proposés. Par ailleurs, ce type d'approche peut, à terme, être utilisé pour construire une solution approchée du problème à l'échelle de la couche limite et être couplé à des calculs à une échelle de description supérieure, intermédiaire entre l'échelle de la couche limite et l'échelle du code d'évaluation réacteur, pour estimer l'impact des structures convectives à l'échelle du puits de cuve sur la structure de la couche limite et sur la nature des échanges.

Dans cette partie, nous commençons par présenter le contexte général dans lequel s'inscrit ce travail qui correspond à une description et une modélisation multi-échelle des échanges. Nous discutons en particulier la problématique associée au changement d'échelle et précisons notre contribution, qui s'inscrit dans le cadre de la construction de lois de parois. Nous présentons ensuite l'approche par simulation numérique directe à l'échelle du front d'ablation en précisant les caractéristiques des écoulements étudiés dans ce travail et le choix d'une méthode. Enfin, nous terminons cette partie par une présentation du plan du mémoire.

### I.4.1 Vers une description multi-échelle

Ce travail s'inscrit dans le cadre plus général d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges, c'est-à-dire de l'échelle locale jusqu'à l'échelle du code d'évaluation réacteur. On distingue ici les trois échelles caractéristiques suivantes (*cf.* Fig.I.8) :

1. L'échelle locale, dont la longueur caractéristique correspond typiquement à quelques diamètres de bulles de gaz de décomposition du béton, ou encore à la taille des plus gros tourbillons générés par les instabilités de Rayleigh-Taylor au voisinage du front d'ablation.
2. L'échelle macroscopique associée aux mouvements convectifs dans le bain de corium générés par les mouvements d'ensemble des bulles.
3. L'échelle du code d'évaluation réacteur associée à une description point ou à zones.

L'échelle locale correspond à l'échelle de description des outils de simulation numérique directe (SND) des écoulements à interfaces et fait l'objet de la section suivante. L'échelle macroscopique correspond, dans le cadre d'une description Euler-Euler (i.e description Eulérienne de la phase dite continue associée ici au corium et description également Eulérienne de la phase dispersée correspondant aux bulles de gaz de décomposition) à l'échelle de description des modèles macroscopiques de type bi-fluides obtenus par prise de moyenne (moyenne d'ensemble, spatiale, ...) des équations locales instantanées. L'outil existant développé dans le cadre de l'interaction corium-béton est le code TOPASE (TwO-PhAse flow SolvEr) et correspond à un modèle bi-fluides dans la limite des faibles accélérations relatives (i.e modèle à vitesse de dérive ou drift-flux). Quel que soit la modélisation macroscopique adoptée (i.e modèles bi-fluides ou à vitesse de dérive) et, de manière similaire à la description macroscopique des milieux poreux, l'écoulement diphasique est représenté à cette

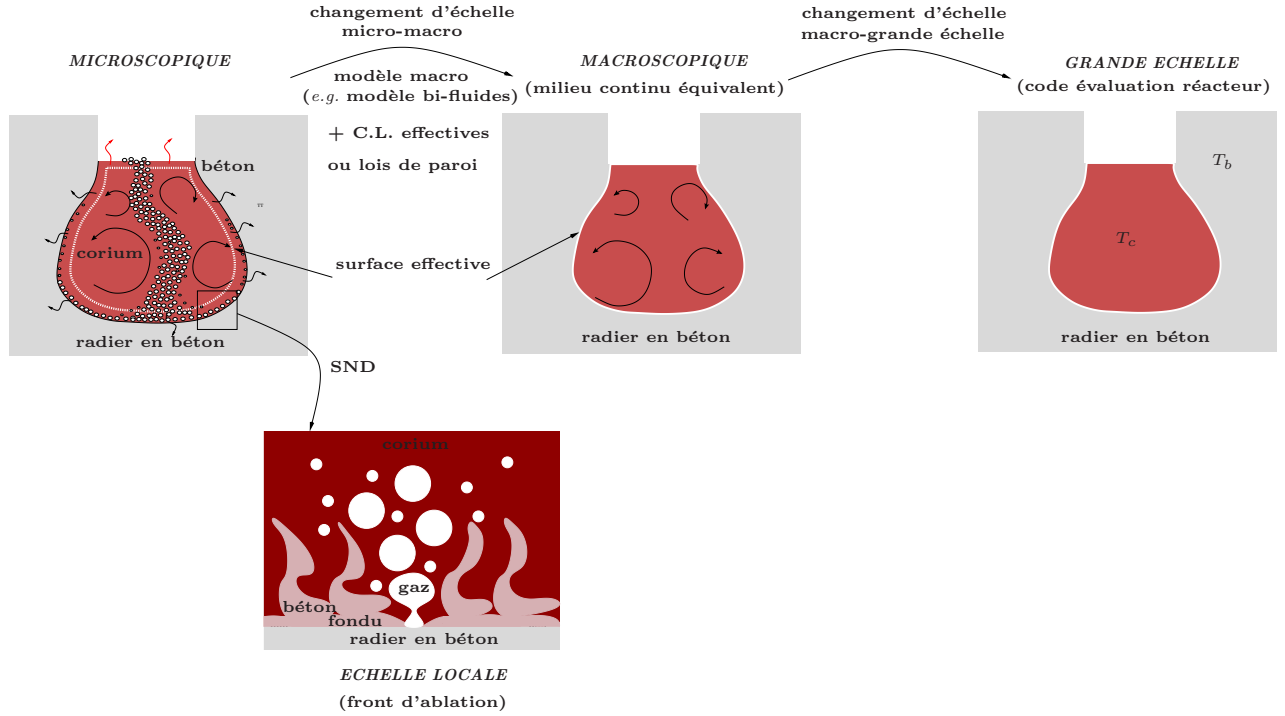


FIG. I.8: Une description multi-échelle des échanges pour la problématique de l'interaction corium-béton.

échelle par un milieu continu équivalent. Toute la difficulté est reportée dans la détermination des coefficients de transport effectifs (coefficient de traînée effectif, conductivité effective, ...). Enfin, l'échelle du code d'évaluation réacteur MEDICIS correspond à une description à grande échelle des échanges pour laquelle le mélange multiphasique dans le puits de cuve est décrit par une température point moyenne et les échanges avec le béton sont décrits au travers d'une résistance thermique équivalente intégrant l'ensemble des échanges aux échelles inférieures.

Une telle description multi-échelle soulève le problème du changement d'échelle et, en particulier, le passage de l'échelle locale à l'échelle de description macroscopique du code TOPASE. Les difficultés associées à ce changement d'échelle sont bien connues et peuvent être classées selon deux problématiques.

La première problématique concerne la fermeture des termes d'échange entre phases (force de traînée macroscopique, ...) et la modélisation de la turbulence diphasique ainsi que l'estimation des coefficients de transport effectifs correspondant aux différentes fermetures. Cette problématique a fait l'objet de nombreux travaux et continue d'être d'actualité; on cite ici en particulier, toujours dans le cadre d'une description macroscopique de type Euler-Euler, les travaux de Simonin & al. [137] dans le contexte des écoulements diphasiques fluide-particules et les travaux de Magdeleine [111] pour le cas fluide-bulles sur l'utilisation de méthodes de simulation numérique directe pour l'estimation des coefficients de transport effectifs.

La deuxième problématique concerne, pour un modèle macroscopique d'écoulement donné, la construction de conditions aux limites effectives ou lois de parois. Cette problématique n'est pas spécifique aux écoulements diphasiques, elle est bien sûr commune aux problèmes faisant intervenir plusieurs échelles de description comme les problèmes de turbulence monophasique ou les problèmes d'écoulement sur des surface hétérogènes (e.g rugosités). Cette problématique a fait l'objet de nombreux travaux dans le cas des écoulements monophasiques turbulents sur surface lisse ou rugueuse et connaît plus récemment un regain d'attention d'un point de vue théorique



dans le cas des écoulements laminaires sur des surfaces hétérogènes. Le cas plus complexe des surfaces hétérogènes ablatables et/ou des écoulements à bulles a, en revanche, reçu beaucoup moins d'attention. Dans le cas monophasique, on peut néanmoins citer les travaux d'Aspa *et al.* (*e.g.* [8, 149]) sur l'étude et la construction de lois de parois pour des surfaces hétérogènes réactives lisses ou rugueuses. Dans le cas des écoulements diphasiques, on peut citer les travaux de [112, 143] pour des parois imperméables et pour des écoulements à faible taux de vide (*i.e.* faiblement chargé en bulles) visant à montrer que les lois de parois monophasique pour la phase continue restent une bonne approximation ainsi que les travaux de Gabillet *et al.* [63] indiquant que, pour des parois percolées par un flux de gaz, les bulles formées en parois jouent le rôle de rugosité pour la loi de paroi associée à la phase continue.

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la deuxième problématique associée à la construction de conditions aux limites effectives et comprend deux contributions suivant une approche commune de type décomposition de domaine.

La première contribution concerne la construction de lois de parois selon un modèle de surface effective ainsi qu'une étude sur la qualité de l'approximation proposée à partir de comparaisons entre calculs directs et calculs effectifs. Devant la complexité du problème posé, principalement les aspects diphasiques, on se propose ici d'aborder un problème plus simple d'écoulement laminaire de convection naturelle sur parois rugueuses. Le problème traité reste encore éloigné des applications visées et cette contribution doit être vue comme une première étape vers la construction de lois de parois pour un modèle macroscopique d'écoulement diphasique compositionnel. Signalons néanmoins que la méthodologie proposée dans ce travail pour un problème couplant l'écoulement au transport d'un scalaire non-passif peut servir de base pour l'étude des aspects hétérogènes associés aux différents types de béton constituant le radier des réacteurs actuels. On rappelle en effet que les hétérogénéités associées à la distribution des agrégats et du mortier sont susceptibles de jouer un rôle important sur la structure de la couche limite, par exemple pour les bétons siliceux caractérisés par des agrégats constitués majoritairement de silice à haut point de fusion comparativement au mortier. La méthodologie proposée peut également servir de base pour les études et les analyses de sûreté des réacteurs de nouvelle génération de type EPR ; on pense ici en particulier au système de refroidissement de la chambre d'étalement ainsi qu'au récupérateur qui correspond également à un matériau hétérogène mais sans dégagement de gaz de décomposition et dont le rôle principal est d'abaisser la viscosité du corium. Enfin, dans le cadre des études et des analyses de sûreté, d'autres problématiques sont concernées comme, par exemple, celle associée à la dispersion et la déposition de radio-éléments au voisinage d'un rejet accidentel sur la canopée urbaine ou végétale qui, dans ce cas, jouent le rôle d'hétérogénéités de surface. Nous avons indiqué précédemment que la problématique associée à la construction de conditions aux limites effectives connaissait un regain d'attention d'un point de vue théorique dans le cas des écoulements laminaires sur des surfaces hétérogènes. Plusieurs méthodes ont été proposées pour réaliser le changement d'échelle comme la méthode des moyennes volumiques (*e.g.* [127, 152]) ou la méthode des développements asymptotiques à deux échelles (*e.g.* [3, 11]). Dans ce travail, nous reprenons une approche proposée par Véran *et al.* [149] et les lois de parois sont développées dans le cadre d'une méthode de type décomposition de domaine.

Dans le cas plus complexe des écoulements multiphasiques, une telle approche ou, de manière plus générale, le développement de conditions effectives, nécessite, dans un premier temps, de disposer d'un outil de simulation directe à la petite échelle pour la construction d'une solution approchée à l'échelle de la couche limite. Ainsi, la deuxième contribution de ce travail concerne la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation et fait l'objet de la prochaine section. Signalons que des approches de même type ont été suivies pour d'autres applications multiphasiques. Nous citons ici, par exemple, les travaux de Lapuerta *et al.* (*e.g.* [25, 106]) toujours dans le cadre de la problématique de l'interaction

corium-béton mais dans le cas d'une configuration stratifiée pour les échanges oxyde-métal et les travaux d'Aspa [8] pour les problèmes d'ablation des matériaux composites constituant les lanceurs d'Ariane.

### I.4.2 Simulation numérique directe à l'échelle du front d'ablation

Parmi les nombreux phénomènes potentiellement mis en jeu au voisinage du front d'ablation, nous avons vu précédemment que l'écoulement était caractérisé principalement par la présence d'une phase gazeuse associée aux gaz de décomposition du béton et d'une phase liquide constituée par le mélange issu de la fusion du coeur, le corium, et les produits issus de l'ablation du béton. Dans ce travail, nous ne décrirons pas les nombreux phénomènes d'oxydation mettant en jeu les différentes espèces gazeuses et nous assimilerons les gaz de décomposition à une seule et même phase gazeuse. Nous adopterons également une description classique de la phase liquide consistant à décrire le mélange multiphasique multiconstituant corium-béton selon un pseudo-binaire. Dans ce cadre, une simulation numérique directe à l'échelle du front d'ablation doit a minima être capable de décrire les écoulements présentant les caractéristiques suivantes :

- présence de deux phases non-miscibles : liquide et gaz,
- phase liquide constituée de deux espèces totalement miscibles : pseudo-binaire corium-béton,
- forts changements topologiques : détachement, rupture et coalescence de bulles, instabilités de Rayleigh-Taylor (miscibles),
- forts contrastes de propriétés physiques : densité, viscosité, ...
- faibles coefficients de diffusion massique et thermique,
- géométrie 3D.

Nous adopterons en outre les deux hypothèses simplificatrices suivantes :

- incompressibilité de chaque phase ou fluide,
- tensions de surface associées aux couples gaz-corium et gaz-béton fondu identiques.

La première hypothèse consiste à négliger les effets de compressibilité associées à la phase gazeuse et à négliger les variations de masse volumique des espèces corium et béton fondu en fonction de la température. Nous ne sommes pas en mesure de justifier pleinement cette hypothèse sur la base de considérations physiques et cette approximation est essentiellement motivée par les simplifications apportées dans la construction et la résolution numérique de l'outil de simulation. La deuxième hypothèse apporte également des simplifications importantes puisque, d'un point de vue des effets de tension de surface, l'écoulement est essentiellement diphasique. Il faut néanmoins souligner que cette hypothèse n'est pas restrictive pour les applications visées devant les incertitudes associées à l'estimation des tensions de surface du mélange corium-béton fondu. Enfin, nous décrirons dans ce travail les effets associés à la présence de zones pâteuses dans la phase liquide au travers d'une viscosité effective.

Ainsi, d'un point de vue de la simulation numérique directe des problèmes à interfaces, il s'agit ici de construire un outil couplant un problème diphasique incompressible sans changement de phase à un problème de mélange de deux fluides miscibles dans l'une des deux phases.

De nombreuses méthodes ont été proposées pour la simulation numérique directe d'écoulements diphasiques incompressibles. On distingue essentiellement trois types de méthodes :

1. Les méthodes à maillage mobile, pour lesquelles le maillage s'adapte à la topologie des interfaces et les conditions de saut sont imposées de manière exacte, comme par exemple la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian).
2. Les méthodes à maillage mixte ou méthodes de type Front-Tracking (*e.g.* [145, 146]) pour lesquelles un maillage surfacique décrivant la topologie des interfaces est advecté sur un maillage volumique fixe.

3. Les méthodes à maillage fixe pour lesquelles les interfaces sont repérées et décrites au travers d'une indicatrice de phase plus ou moins régulière selon les méthodes. Dans ce cas, on distingue, d'une part, les méthodes avec reconstruction des interfaces comme la méthode VOF (*e.g.* [20, 81]) et, d'autre part, les méthodes sans reconstruction comme les méthodes de lignes de niveaux (Level-Set) (*e.g.* [64, 140]) et les méthodes d'interface diffuse, encore appelées méthodes de champ de phase (Phase-Field) (*e.g.* [5]).

Il n'est pas dans l'objectif de ce travail de présenter une revue exhaustive et une discussion des différentes méthodes proposées. Le lecteur intéressé pourra se reporter aux références citées ainsi qu'à Jamet [87] et Kim et Lowengrub [101] pour une présentation et une discussion sur les avantages et les points faibles des différentes méthodes. Il est néanmoins important de noter que, en pratique, ces méthodes ne sont généralement pas des méthodes de simulation numérique directe au sens strict du terme. En effet, si les interfaces sont résolues, en revanche, les échelles des phases sont généralement sous résolues et ces méthodes doivent plutôt être vues comme des méthodes de type LES (Large Eddy Simulation). Nous n'aborderons pas dans ce travail la modélisation des contributions non-résolues, ou contributions sous maille, qui fait également débat en turbulence monophasique selon si ces contributions sont résolues de manière dite explicite ou implicite. Nous renvoyons le lecteur intéressé aux travaux de Jamet *et al.* [89] pour une approche de type explicite pour la simulation directe d'écoulements à bulles et, en s'appuyant sur les travaux proposés par Guermond [73, 76] dans le cas monophasique, nous assimilerons dans ce travail le schéma numérique proposé à une approche de type implicite.

Nous nous sommes dans ce travail plus particulièrement intéressés aux méthodes à interface diffuse qui, de notre point de vue, offrent un cadre bien adapté pour des extensions multiphasiques et/ou multiconstituants. Le principe général des méthodes Phase-Field dans le cas diphasique consiste à décrire l'évolution du système à partir d'une énergie libre comprenant deux contributions distinctes fonction d'une indicatrice de phase régularisée, appelée également champ de phase ou paramètre d'ordre. La première contribution est un terme non-convexe présentant une structure en double puits et modélisant la séparation de phases. La deuxième contribution est un terme capillaire dépendant du gradient du paramètre d'ordre jouant à l'inverse un rôle de diffusion et de régularisation. La résultante de ces deux contributions conduit à une description des interfaces comme des zones de transition volumique d'épaisseur finie et la contribution capillaire associe une force volumique aux effets de tension de surface. Pour des écoulements diphasiques sans changement de phase, le paramètre d'ordre est souvent associé à la fraction volumique ou la fraction massique de l'une des deux phases et l'équation d'évolution associée est l'équation de Cahn-Hilliard caractérisée par un terme en bi-laplacien. Pour des problèmes avec changement de phase, le paramètre d'ordre n'a généralement pas de réelle signification physique et l'équation d'évolution associée est l'équation d'Allen-Cahn caractérisée par un terme en laplacien. De nombreuses extensions multiphasiques et/ou multiconstituants ont été proposées et nous citons ici à titre d'exemple les travaux de Lapuerta *et al.* (*e.g.* [25, 106]) pour une extension dans le cas de trois phases non-miscibles et les travaux de Kessler [98] et Kim [99] pour des extensions multiconstituants dans le cas diphasique avec ou sans changement de phase. Nous rappelons qu'il s'agit ici de construire un outil de simulation numérique directe pour des écoulements diphasiques sans changement de phase dont l'une des deux phases est constituée de deux espèces totalement miscibles. Si de nombreuses extensions multiphasiques et/ou multiconstituants ont été proposées, il n'existe pas à notre connaissance de modèles pour de tels écoulements diphasiques compositionnels. On peut néanmoins citer les travaux de Kim [99] et Park *et al.* [121] pour des mélanges partiellement ou totalement miscibles où le terme en bi-laplacien de l'équation de Cahn-Hilliard est assimilé à un terme de diffusion.

Dans ce contexte, on propose dans ce travail un modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel construit sur la base d'une description du système selon trois paramètres d'ordre associés respectivement au gaz, au corium et au béton fondu.

## I.5 Objectifs de l'étude

L'objectif de ce travail est d'apporter une contribution à la modélisation des échanges de masse et de chaleur dans le cadre de la problématique de l'interaction corium-béton. Nous avons indiqué précédemment que ce travail s'inscrivait dans le cadre plus général d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges afin de contribuer à l'analyse et l'interprétation des programmes expérimentaux menées sur cette problématique et, à terme, de proposer des modèles d'échanges pour les codes d'évaluation réacteur. Après avoir présenté les différentes échelles de description considérées et les outils de simulation existants, nous avons également précisé les deux contributions spécifiques de ce travail. La première est associée au problème du changement d'échelle et concerne la construction de conditions aux limites effectives. La deuxième est associée au problème de la description locale et concerne la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation.

Ainsi, nous abordons dans le chapitre (II) le problème de la construction de conditions aux limites effectives. Devant la complexité du problème posé à l'échelle du front d'ablation, ces lois sont construites pour un écoulement laminaire anisotherme sur parois rugueuses et testées numériquement pour un problème de convection naturelle dans une cavité rugueuse différentiellement chauffée. Si cette contribution doit être vue comme une première étape pour les applications multiphasiques visées, l'intérêt du problème considéré est double. Les aspects turbulents et multiphasiques étant absents, ce problème présente, d'une part, l'intérêt d'isoler du problème du changement d'échelle la construction de conditions aux limites effectives et d'estimer numériquement la qualité de l'approximation proposée par comparaison avec des calculs directs. D'autre part, nous avons également indiqué que ce problème couplant l'écoulement au transport d'une grandeur non-passive correspondant ici à la température pouvait être vu comme un problème modèle pour la modélisation des aspects hétérogènes des bétons pour les réacteurs actuels (REP) et les réacteurs de nouvelle génération de type EPR. Dans ce travail, les lois de parois sont développées dans le cadre d'une méthode de type décomposition de domaine [149] consistant à découper le domaine de calcul en un premier sous-domaine au sein duquel les échelles caractéristiques de variation correspondent à la dimension caractéristique du domaine d'intérêt et un deuxième sous-domaine contenant les variations spatiales de l'ordre de la dimension des rugosités. Cette décomposition à deux échelles du domaine, similaire à une décomposition en variables lentes et rapides proposée par exemple par Achdou & al. [3] dans le cadre d'une méthode d'homogénéisation, conduit naturellement à deux systèmes d'EDPs macro-micro couplés par des conditions de transmission de type Dirichlet-Neumann. Des conditions aux limites dites effectives, c'est-à-dire pour les variables macroscopiques du premier sous-domaine, à l'interface de couplage sont alors construites en s'inspirant de méthodes développées pour le changement d'échelle en milieu poreux [127]. Elles sont obtenues sur la base d'estimateurs des champs de vitesse, de pression et de température dans le deuxième sous-domaine s'appuyant sur la résolution de problèmes de fermeture locaux sur un motif représentatif des rugosités. Ces lois sont testées numériquement par comparaison avec des calculs directs tenant compte des rugosités et une étude est menée sur le problème générique important du positionnement de la surface effective.

Dans le cas plus complexe des écoulements multiphasiques, nous avons indiqué que le développement de conditions effectives nécessitait au préalable de disposer d'un outil de simulation directe à la petite échelle. La construction d'un outil de simulation numérique directe d'écoulements diphasiques incompressibles sans changement de phase dont l'une des deux phases est constituée de deux espèces totalement miscibles fait l'objet du chapitre (III). On propose un modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel s'appuyant d'une part sur une description du système selon trois paramètres d'ordre associées respectivement aux fractions volumiques du gaz et aux deux espèces miscibles de la phase liquide et d'autre part, sur une décomposition de l'énergie libre selon une contribution diphasique et une contribution compositionnelle. Les équations de transport du

modèle sont obtenues dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles selon deux contraintes pour la vitesse du mélange. La première contrainte est associée à la partie purement compositionnelle et correspond à une définition barycentrique classique de la vitesse du mélange pondérée par les masses volumiques. La deuxième contrainte est associée à la partie purement diphasique et correspond à une moyenne volumique permettant dans ce cas de conserver une vitesse de mélange à divergence nulle comme les autres méthodes de simulation numérique directe (*e.g.* VOF [20, 81] , Level-Set [64, 140], Front-Tracking [145, 146]). Sur la base de travaux existants proposés pour un modèle de trois phases non-miscibles (*e.g.* [25, 26, 106]), le modèle est discrétisé en temps selon une méthode à pas fractionnaire découplant les équations de Cahn-Hilliard, de Navier-Stokes et d'énergie et la discrétisation en espace correspond à une méthode d'éléments finis. Plusieurs expériences numériques sont proposées illustrant la validité et les potentialités de la méthode et une approche originale est proposée pour le traitement des conditions aux limites artificielles de sortie.

Enfin, nous abordons dans le chapitre (IV) le problème de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation par simulation numérique directe du problème diphasique compositionnel au voisinage du front d'ablation. Nous considérons dans un premier temps des écoulements purement compositionnels et couplons l'outil de simulation développé dans le chapitre (III) à une méthode ALE pour décrire le déplacement du front d'ablation. Une étude est menée sur le choix et l'influence de la viscosité du mélange ainsi que sur la prise en compte de zones pâteuses selon une viscosité effective. On considère pour cette étude deux bétons mis en oeuvre dans les expériences VULCANO (*e.g.* [31]) de type siliceux et silico-calcaire pour lesquels la fraction volumique solide a été tabulée en fonction de la température et de la composition du mélange. Nous présentons enfin des premiers résultats dans le cas diphasique compositionnel ainsi qu'une discussion préliminaire sur la structure de la couche limite des configurations étudiées.

## Chapter II

# Modèles de surfaces effectives pour des écoulements laminaires anisothermes sur parois rugueuses

### II.1 Introduction

Nous avons vu dans le chapitre d'introduction générale qu'une modélisation macroscopique des problèmes mettant en jeu plusieurs échelles de description soulevait le problème du changement d'échelle. Nous avons en particulier indiqué que, pour un modèle macroscopique donné, les difficultés concernaient non seulement l'estimation des coefficients de transport effectifs du modèle mais également la construction de conditions aux limites effectives ou lois de parois. Ces difficultés sont bien connues et ont fait l'objet de nombreux travaux, en particulier pour les modélisations de type RANS des problèmes d'écoulements turbulents sur surface lisse ou rugueuse. La construction de conditions aux limites effectives a connu plus récemment un regain d'intérêt d'un point de vue théorique dans le cas des écoulements laminaires sur surfaces rugueuses ou des milieux poreux.

Dans ce chapitre, nous développons des conditions aux limites effectives pour des écoulements laminaires avec transfert de chaleur sur parois rugueuses dans le cadre d'une approximation de Boussinesq. Nous rappelons que si, pour les applications multiphasiques visées, cette contribution doit être vue comme une première étape, le problème considéré couplant l'écoulement au transport d'une grandeur non-passive correspondant ici à la température constitue néanmoins un problème modèle pour l'étude et la modélisation des aspects hétérogènes des bétons des réacteurs actuels et de nouvelle génération de type EPR (European Pressure Reactor). Par exemple, pour les bétons siliceux caractérisés par des agrégats constitués majoritairement de silice à haut point de fusion comparativement au mortier, les développements proposés peuvent servir de base pour la construction de conditions effectives mettant en jeu une température de fusion effective fonction de la distribution des agrégats et de la structure des rugosités au front d'ablation.

Les conditions aux limites effectives sont développées dans le cadre d'une méthode de type décomposition de domaine. Nous nous appuyons ici sur les développements proposés par Véran *et al.* [149] en explicitant de manière détaillée les différentes étapes du changement d'échelle et en soulignant également les liens avec les méthodes de changement d'échelle s'appuyant soit sur des techniques de développements asymptotiques soit sur des modélisations dites mésoscopiques. Les conditions effectives sont ensuite testées sur un problème de convection naturelle dans une cavité rugueuse différentiellement chauffée. La qualité de l'approximation proposée est estimée en comparant, pour différents nombre de Rayleigh, les calculs effectifs à des calculs directs tenant compte des rugosités et une étude est menée sur le problème générique du positionnement de la surface effective, problème souvent occulté dans les travaux antérieurs.



Ces travaux ont fait l'objet d'un article soumis à une revue à comité de lecture [84] reproduit dans la section suivante.

## II.2 Article : Effective surface modeling for momentum and heat transfers over rough surfaces : application to a natural convection problem

Clément Introïni <sup>a,b</sup>, Michel Quintard <sup>b,c</sup>, Fabien Duval <sup>a</sup>

*International Journal of Heat and Mass Transfer*

<sup>a</sup>*Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN),*

*Direction de Prévention de Accidents Majeurs, BP3-13115 Saint-Paul-lez-Durance Cedex*

<sup>b</sup>*Université de Toulouse ; INPT, UPS ; IMFT, Toulouse, 1 Allée du Pr C. Soula,  
31400 Toulouse, France*

<sup>c</sup>*CNRS ; IMFT -F31400*

**Abstract :** In this paper, we propose efficient and suitable effective surface models for steady laminar flows with heat transfer over rough surfaces. These models are developed in the frame of a domain decomposition method and consist in replacing the rough boundaries by effective smooth surfaces on which effective boundary conditions or wall laws are prescribed. The associated effective properties, namely the effective friction and heat transfer coefficients, are determined by the resolution of local *closure problems* over a representative pattern of the roughnesses. The impact of the flow parameters on these effective coefficients is analyzed, which allows to obtain useful estimates in some specific cases. Finally, numerical experiments are performed for a natural convection problem in a stamp shaped cavity to assess the validity of the proposed effective surface models. Throughout these tests, we also study numerically the impact of the position of the effective surface on momentum and heat transfers.

**Keywords :** domain decomposition method, rough surfaces, effective boundary conditions, closure problems, laminar natural convection flow

# Nomenclature

## Greek symbols

$\beta$	thermal expansion coefficient ( $\text{K}^{-1}$ )
$\delta$	effective surface position (m)
$\delta_0$	fictitious surface position (m)
$\epsilon$	$= \ell/L$ small parameter in asymptotic expansions (dimensionless)
$\Gamma_{0i}$	restriction of $\Gamma_0$ in $\Omega_i$ (dimensionless)
$\Gamma_0$	fictitious surface (dimensionless)
$\Gamma_\delta$	effective surface (dimensionless)
$\Gamma_{per}$	periodic surface (dimensionless)
$\Gamma_s$	side surface (dimensionless)
$\Gamma_{up}$	upper surface (dimensionless)
$\Gamma_w$	rough surface (dimensionless)
$\kappa$	thermal diffusivity ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ )
$\mu$	dynamic viscosity ( $\text{Pa.s}$ )
$\Omega$	global domain (dimensionless)
$\Omega_1$	sub-domain associated with the length scale $L$ (dimensionless)
$\Omega_2$	sub-domain associated with the length scale $\ell$ (dimensionless)
$\Omega_\delta$	effective domain (dimensionless)
$\Omega_i$	pseudo-periodic unit cell (dimensionless)
$\rho$	density ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$\tau_\ell$	$= \text{Re}_\ell \mu^2 / \rho \ell^2$ imposed shear stress ( $\text{s}^{-1}$ )

## Roman symbols

$\langle \text{Nu} \rangle$	averaged Nusselt number (dimensionless)
$\langle \text{Nu}_\delta \rangle$	averaged Nusselt number in the effective case (dimensionless)
$\langle \text{Nu}_r \rangle$	averaged Nusselt number in the rough case (dimensionless)



$\langle \text{Nu}_s \rangle$	averaged Nusselt number in the smooth case (dimensionless)
<b>A</b>	closure variable for the velocity (dimensionless)
<b>a</b>	closure variable for the pressure (Pa.s.m <sup>-1</sup> )
<b>B</b>	closure variable for the velocity (m)
<b>b</b>	closure variable for the pressure (Pa.s)
$\Delta T_\ell$	micro-scale temperature difference (K)
$\Delta T_L$	macro-scale temperature difference (K)
$\ell$	micro-scale length (m)
<b>n</b>	exterior normal to $\Gamma_w$ (dimensionless)
<b>n<sub>0</sub></b>	exterior normal to $\Gamma_0$ (dimensionless)
$\text{Pe}_\ell$	$= U\ell/\kappa$ micro-scale Péclet number (dimensionless)
$\text{Pe}_L$	$= UL/\kappa$ macro-scale Péclet number (dimensionless)
$\text{Pr}$	micro-scale Péclet number (dimensionless)
$\text{Ra}_\ell$	$= \text{Pr} \rho^2 \beta \Delta T_\ell g \ell^3 / \mu^2$ micro-scale Rayleigh number (dimensionless)
$\text{Ra}_L$	$= \text{Pr} \rho^2 \beta \Delta T_L g L^3 / \mu^2$ macro-scale Rayleigh number (dimensionless)
$\text{Re}_\ell$	$= \epsilon \rho U \ell / \mu$ micro-scale Reynolds number (dimensionless)
$\text{Re}_L$	$= \rho U L / \mu$ macro-scale Reynolds number (dimensionless)
$\tilde{\mathbf{u}}_2$	spatial deviation velocity (m.s <sup>-1</sup> )
$\tilde{p}_2$	spatial deviation pressure (Pa)
$\tilde{T}_2$	spatial deviation temperature (K)
<b>u</b>	velocity defined in $\Omega$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>u<sub>1,0</sub></b>	spatial restriction of velocity on $\Gamma_0$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>u<sub>1,2</sub></b>	macro-scale velocity defined in $\Omega_2$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>c</b>	closure variable for the temperature (dimensionless)
$C_{f,\delta}$	effective friction coefficient defined on $\Gamma_\delta$ (Pa.s.m <sup>-1</sup> )
$C_f$	effective friction coefficient defined on $\Gamma_0$ (Pa.s.m <sup>-1</sup> )
<b>d</b>	closure variable for the temperature (m)
<b>g</b>	acceleration due to gravity (m.s <sup>-2</sup> )
<b>h</b>	effective heat transfer coefficient defined on $\Gamma_0$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>h<sub>δ</sub></b>	effective heat transfer coefficient defined on $\Gamma_\delta$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>L</b>	macro-scale length (m)

$p$	pressure defined in $\Omega$ (Pa)
$p_{1,0}$	spatial restriction of pressure on $\Gamma_0$ (Pa)
$p_{1,2}$	macro-scale pressure defined in $\Omega_2$ (Pa)
$T$	temperature defined in $\Omega$ (K)
$T_{1,0}$	spatial restriction of temperature on $\Gamma_0$ (K)
$T_{1,2}$	macro-scale temperature defined in $\Omega_2$ (K)
$T_r$	reference temperature defined in $\Omega$ (K)
$T_w$	temperature defined on $\Gamma_w$ (K)
$U$	magnitude of the macro-scale velocity ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$x$	abscissa (m)
$y$	ordinate (m)

### II.2.1 Introduction

Fluid flow with heat and mass transfer over rough surfaces appears in a large number of situations of practical interest including geophysical applications to study, for instance, ocean-ice exchanges, design of heat-exchangers or, in the aerospace context, the design of thermal barriers in reentry vehicle configurations. Transport phenomena over rough surfaces also take an important place in nuclear safety studies. As a first example, in the case of an accidental release of radioactive wastes, there is a strong interest to predict the dispersion of the radioactive elements in the near field release region (*e.g.* [123]). In this situation, the roughnesses that correspond to both the vegetal and the urban canopies remain much smaller than the near field region dimensions but play an important role in the dispersion and the deposition process and, therefore, in the source term evaluation. In the context of severe accident conditions, another situation of interest concerns the issue of molten core and concrete interaction where a molten mixture of core and vessel structures comes to interact with the concrete basement of the nuclear plant (*e.g.* [82, 94]). During the concrete ablation process, roughnesses appear both at small scales due to concrete heterogeneities (mortar, silica aggregates, ...) and at intermediate scales due to vigorous mixing (bubbling, compositional convection). Here again, the roughnesses remain smaller than the domain of interest which corresponds here to the reactor pit but are likely to alter the heat fluxes along the cavity shape and then the melting-throw time.

To tackle numerically these kinds of problems, two approaches are traditionally followed depending on the order of magnitude of the characteristic length scale  $\ell$  of the roughness compared to the macro-scale dimension  $L$  of the domain of interest. On the one hand, when the two characteristic length scales have the same order of magnitude, it is still possible to describe the complicated roughness geometry since Direct Numerical Simulations (DNSs) remain tractable. On the other hand, when  $\ell \ll L$ , DNSs become too expensive and cannot be achieved anymore for practical applications, especially for three-dimensional applications. In this case, the problem is characterized by two separated scales  $\ell$  and  $L$  which are referred to as the micro- and the macro-scale respectively. Then, the traditional way of solving these problems consists in describing the micro-scale average behavior by means of effective surface models, which replace the heterogeneous boundary by a smooth surface on which effective conditions or wall laws are prescribed. While such wall laws

have been the subject of numerous studies in the case of turbulent flow over rough surfaces, the building of these laws in the case of laminar flow has received more recently a regain of attention from a theoretical point of view. A large number of studies have been devoted to the derivation of effective boundary conditions for laminar flows over rough surfaces using homogenization methodology (*e.g.* [3, 12, 114]). The obtained wall law, for the momentum equation, takes the form of a Navier boundary condition that relates the macro-scale tangential velocity to the macro-scale shear rate through an effective friction coefficient, which has to be determined by solving a local boundary value problem. In microfluidics, the derivation of effective conditions has also been the subject of numerous studies for laminar flows over rough and hydrophobic surfaces (*e.g.* [124]). In such applications involving nano-scales geometries, the corresponding effective conditions are referred to as the effective stick-slip boundary condition. This latter example, however, may be considered as slightly different of the exposed problem since an additional length-scale may play an important role, namely, the particle mean free path. For flows over porous media, which present some similarities with the rough surface case, the development of effective boundary conditions has also been revisited since the semi-empirical relation of Beavers and Joseph [14] through different up-scaling methods such as the volume averaging approach [70], matched asymptotic expansions [37] and multi-scale asymptotics [9, 86] to cite among others.

In the present paper, we are interested in building effective boundary conditions for steady laminar flows with heat transfer by a domain decomposition method. As this study constitutes a first step towards more complicated problems such as those listed above for nuclear safety study analysis, this relatively simplified problem constitutes a model problem coupling flow with the transport of a non-passive scalar. Such a problem has received considerable attention (*e.g.* [4, 90, 153]) to investigate the impact of roughnesses on heat transfer. It has been emphasized that the presence of roughnesses leads to an enhancement of the total heat transfer rate, which is influenced by different parameters such as, for example, the wavelength and the amplitude of the roughnesses.

To be specific about the problem under consideration, we focus in this work on steady laminar natural convection flows over rough surfaces in the frame of the Boussinesq approximation and we refer to the Fig.III.1 in which we have shown the geometrical features of the domain  $\Omega$  with rough boundary  $\Gamma_w$ . The boundary value problem used to describe momentum and heat transfer is given by

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \rho \beta (T - T_r) \mathbf{g} \quad \text{in } \Omega \quad (\text{II.1a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (\text{II.1b})$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T = \kappa \nabla^2 T \quad \text{in } \Omega \quad (\text{II.1c})$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.1d})$$

$$(\text{BC1}) \quad T = T_w \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.1e})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla T = 0 \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.1f})$$

where  $p$  is the deviation from the hydrostatic pressure,  $\mu$  is the dynamic viscosity,  $\beta$  the thermal expansion coefficient,  $\kappa$  the thermal diffusivity and  $T_r$  denotes some reference temperature.

Regarding the boundary conditions imposed on the rough surface  $\Gamma_w$ , no-slip condition is prescribed for the momentum transfer problem while, for the heat transfer problem, either an imposed temperature condition (BC1) or a Neumann homogeneous condition (BC2) is prescribed.

In order to characterize the natural convection flow in  $\Omega$ , we introduce the macro-scale Rayleigh number  $\text{Ra}_L$  defined by

$$\text{Ra}_L = \text{Pr} \frac{\rho^2 \beta \Delta T_L g L^3}{\mu^2} \quad (\text{II.2})$$

where  $\Delta T_L$  denotes some macro-scale temperature difference. In the same way, the macro-scale

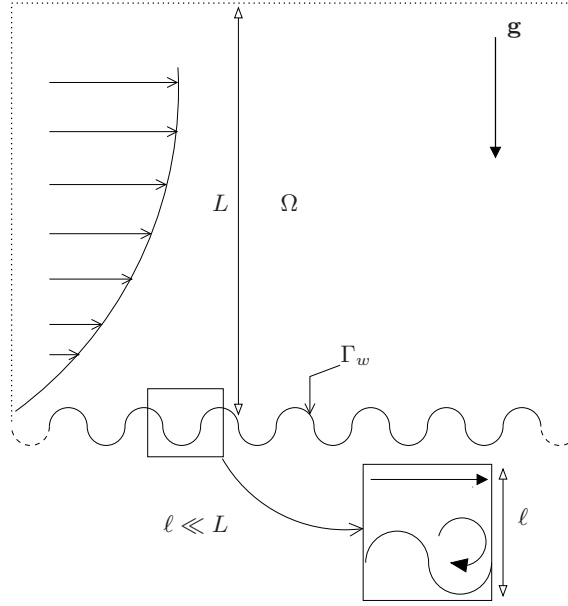


Figure II.1: Schematic representation of an incompressible laminar over a rough surface  $\Gamma_w$

Reynolds number  $\text{Re}_L$  and the macro-scale Péclet number  $\text{Pe}_L$  are introduced in order to characterize respectively flow and heat transfer at the  $L$ -scale. They are defined by

$$\text{Re}_L = \frac{\rho U L}{\mu} \quad ; \quad \text{Pe}_L = \frac{U L}{\kappa} \quad (\text{II.3})$$

where  $U$  denotes the magnitude of the macro-scale velocity. In this study, the micro-scale fluctuations of the temperature and velocity fields due to the presence of heterogeneities are assumed to vanish far enough above the rough surface  $\Gamma_w$ . Under these circumstances, a multi-domain decomposition approach can be followed to build an approximate solution that results in effective boundary conditions prescribed on a smooth effective surface. Firstly introduced by Achdou & *al.* [2] for momentum transfer problem, the concept of domain decomposition has been recently used by Veran & *al.* [149] for a problem of laminar flow over rough reactive walls. Here, such a concept is extended for both momentum and heat transfer problems. The principle of this multi-domain decomposition approach is the object of the first part, section (II.2.2), and then effective boundary conditions are built for both the momentum and heat transfer problems in section (II.3). Throughout the developments, the roughnesses are assumed to be small compared to the viscous and the thermal boundary layers. This constitutes one of the main assumptions for the validity of the proposed approach allowing to disregard non-local effects for the building of effective conditions (i.e., effective conditions at a given point that would depend on the entire  $L$ -scale fields, and not only on the local ones). Finally, in section (II.3.3), numerical experiments are performed for a natural convection problem in a rough or stamp shaped cavity to assess the validity of the proposed approach. Both DNSs and effective calculations are carried out for macro-scale Rayleigh number  $\text{Ra}_L$  ranging from  $10^3$  to  $10^8$ . We show in particular that the average behavior of the rough surface is correctly described by the effective conditions for  $\text{Ra}_L \leq 10^7$  whereas our approach fails for larger values, i.e.,  $\text{Ra}_L = 10^8$ . In this last section, we also discuss the important question of the position of the effective surface. Interestingly for practical purposes, we will see that the optimal position is given by the effective length at which the momentum effective condition degenerates into a no-slip boundary condition.

## II.2.2 Domain decomposition method

In the system illustrated in Fig.III.2, the initial domain  $\Omega$  is limited by an upper surface  $\Gamma_{up}$  and by side surfaces  $\Gamma_s$ . The foregoing developments do not depend on the boundary conditions prescribed on these surfaces. Therefore, they will only be introduced later on the numerical experiments. As

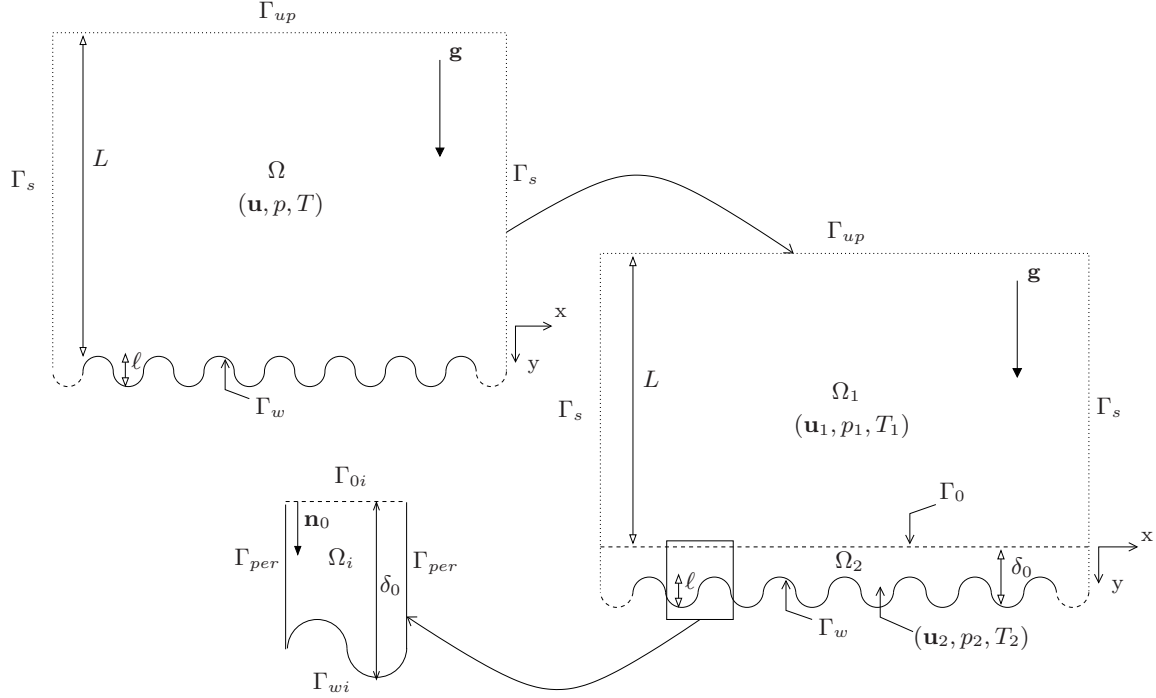


Figure II.2: Schematic domain decomposition principle. First, the initial domain  $\Omega$  is divided into two sub-domains  $\Omega_1$  and  $\Omega_2$ . Second, the study at the  $\ell$ -scale is limited to a pseudo-periodic unit cell  $\Omega_i$ .

previously mentioned, the presence of roughnesses leads to consider two characteristic length scales,  $\ell$  and  $L$ , respectively associated with the fluctuating micro-scale behavior near roughnesses and the macro-scale smooth behavior sufficiently far from the rough boundary. Such a two-scale distinction suggests naturally to split the domain  $\Omega$  in two sub-domains as shown in Fig.III.2. On the one hand, we define a sub-domain  $\Omega_1$  (with  $\star_1$  quantities), in which the velocity and temperature fields undergo significant variations over the large characteristic length scale  $L$ . On the other hand, we define a sub-domain  $\Omega_2$  (with  $\star_2$  quantities,) in which the rough surface is contained and the fields vary significantly with the  $\ell$ -scale. According to this domain decomposition and on the basis of (II.1), one can write two boundary value problems as

- **Problem I** (in  $\Omega_1$ )

$$\rho(\mathbf{u}_1 \cdot \nabla) \mathbf{u}_1 + \nabla p_1 = \mu \nabla^2 \mathbf{u}_1 - \rho \beta (T_1 - T_r) \mathbf{g} \quad \text{in } \Omega_1 \quad (\text{II.4a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_1 = 0 \quad \text{in } \Omega_1 \quad (\text{II.4b})$$

$$\mathbf{u}_1 \cdot \nabla T_1 = \kappa \nabla^2 T_1 \quad \text{in } \Omega_1 \quad (\text{II.4c})$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathcal{F}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_{up} \quad (\text{II.4d})$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_1 \quad (\text{II.4e})$$

• **Problem II** (in  $\Omega_2$ )

$$\rho(\mathbf{u}_2 \cdot \nabla) \mathbf{u}_2 + \nabla p_2 = \mu \nabla^2 \mathbf{u}_2 - \rho \beta (T_2 - T_r) \mathbf{g} \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.5a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_2 = 0 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.5b})$$

$$\mathbf{u}_2 = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.5c})$$

$$\mathbf{u}_2 \cdot \nabla T_2 = \kappa \nabla^2 T_2 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.5d})$$

$$(\text{BC1}) \quad T_2 = T_w \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.5e})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla T_2 = 0 \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.5f})$$

$$\mathbf{u}_2 = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.5g})$$

$$T_2 = \mathcal{H}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.5h})$$

These two boundary value problems are coupled through a fictitious surface  $\Gamma_0$  located at a distance  $\delta_0$  from  $\Gamma_w$  (*cf.* Fig.III.2). As pointed out by Veran & *al.* [149], the position of  $\Gamma_0$  is somewhat arbitrary even if upper and lower bounds can be exhibited according to the micro- macro-scale decomposition. Indeed, on the one hand, this surface must be located sufficiently high above  $\Gamma_w$  so that all perturbations caused by the roughnesses are contained in  $\Omega_2$ . On the other hand, as stated in the introduction, our objective is to build effective conditions prescribed on  $\Gamma_0$  that approximate the average behavior of the micro-scale region. Hence, there certainly exists an upper bound in order for the approximate solution to be valid. We will discuss this point throughout the development of effective conditions.

As  $\Gamma_0$  is not defined by any identified physical phenomenon and corresponds only to a coupling surface, the following transmission boundary conditions apply

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.6a})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-p_1 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{u}_1) = \mathbf{n}_0 \cdot (-p_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{u}_2) \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.6b})$$

$$T_1 = T_2 \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.6c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-\kappa \nabla T_1) = \mathbf{n}_0 \cdot (-\kappa \nabla T_2) \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.6d})$$

where  $\mathbf{n}_0$  represents the unit normal directed from  $\Gamma_0$  towards  $\Gamma_w$ . As in the frame of domain decomposition methods [126], the relationships (II.6) are referred to as a Dirichlet-to-Neumann operator. Since in  $\Omega_1$  the variables are slowly varying and in  $\Omega_2$  they are rapidly varying, this Dirichlet-to-Neumann operator may also be seen as matching conditions in the frame of the method of matched asymptotic expansions where  $\Omega_1$  and  $\Omega_2$  play the role of the inner and the outer regions [38, 37].

As stated in the introduction, rather than tackle numerically this problem following the procedure employed by domain decomposition methods (*e.g.* [126]), our objective is to build an approximation of the Dirichlet-to-Neumann operator defined by (II.6) through effective boundary conditions. This approximate solution is built following similar ideas used in up-scaling methods for porous media [127]. The resulting approximate problem consists in solving the macro-scale problem with effective boundary conditions, or wall laws, that are prescribed on a smooth homogeneous surface, also called effective surface. The role of this surface is to describe the average behavior of the heterogeneous one in the same conditions. In the present paper, effective boundary conditions are developed for the momentum and heat transfer problems, thereby a closed form of the boundary value problem in  $\Omega_1$  for  $(\mathbf{u}_1, p_1, T_1)$  is obtained.

## II.3 Effective boundary conditions

In the frame of domain decomposition-like methods, several studies have been devoted to the derivation of effective boundary conditions for laminar flows over rough surfaces. To our knowl-

edge, Carrau [33] was the first to propose wall laws over periodic surfaces using a homogenization procedure. The approach used in [33] is similar to the one we use in the present paper. The main differences lie in the treatment of the effective surface, or the coupling surface [33], which will be discussed later. Then, wall laws for laminar steady and unsteady flows have been constructed within the framework of two-scale asymptotic expansion techniques by Achdou & *al.* [3], Barrenechea & *al.* [11], Basson et Gerard-Varet [12] and Mikelic et Devigne [114]. In a recent paper, Veran & *al.* [149] have used a multi-domain decomposition approach to obtain effective boundary conditions for momentum and mass transfer problems over rough reactive surfaces. As a continuation of the work proposed by Veran & *al.* [149], we develop here effective boundary conditions for momentum and heat transfer problems. The development of the effective boundary conditions for the momentum problem is revisited through a comprehensive analysis following similar ideas used in up-scaling methods for porous media [127] while highlighting some links with other proposed approaches such as multiple scale asymptotics (*e.g.* [3]) or meso-scale modeling (*e.g.* [38, 119]).

Before building effective conditions, we adopt here the simplified assumption that the momentum and heat transfer problems can be uncoupled at the  $\ell$ -scale in  $\Omega_2$ . This is done by neglecting the buoyancy term  $\rho\beta(T_2 - T_r)\mathbf{g}$  in Eq.(II.5a) thanks to the following estimate

$$\text{Ra}_\ell \ll 1 \quad (\text{II.7})$$

where  $\text{Ra}_\ell = \text{Pr} \rho^2 \beta \Delta T_\ell g \ell^3 / \mu^2$  is the micro-scale Rayleigh number characterizing the natural convection at the  $\ell$ -scale. The relationship between this micro-scale Rayleigh number  $\text{Ra}_\ell$  and the macro-scale one  $\text{Ra}_L$  (defined by (II.2)) is given by

$$\text{Ra}_\ell = \text{Ra}_L \epsilon^3 \frac{\Delta T_\ell}{\Delta T_L} \quad (\text{II.8})$$

where  $\epsilon = \ell/L$ . From this relationship, the decoupling assumption given by (II.7) appears to be valid provided that the following constraint is satisfied

$$\epsilon^3 \frac{\Delta T_\ell}{\Delta T_L} \ll \frac{1}{\text{Ra}_L} \quad (\text{II.9})$$

It appears to be difficult to give precise estimates for  $\Delta T_\ell$  and thus to assess the validity of the constraint (II.9). Hence, at this stage, we just provide below rough estimates that permit to satisfy this constraint. This is done by assuming that the roughnesses are well contained in the boundary layer. Indeed, on the one hand, for vertical walls, the boundary layer thickness is of order  $\text{Ra}_L^{-1/4}$  [69]. Therefore, the rough estimate  $\Delta T_\ell \sim \epsilon \Delta T_L$  is sufficient to satisfy the decoupling assumption  $\text{Ra}_\ell \ll 1$ . On the other hand, for horizontal walls, the boundary layer thickness is of order  $\text{Ra}_L^{-1/5}$  [135]. In this case, a more restrictive estimate in terms of  $\Delta T_\ell \sim \epsilon^2 \Delta T_L$  has to be adopted in order to satisfy the decoupling assumption. In this study, we assume that the rough estimate  $\Delta T_\ell \sim \epsilon \Delta T_L$  is valid. As such an estimate seems to be reasonable, it is nonetheless more difficult to prove it and we acknowledge that the resulting decoupling assumption may be too drastic in many situations. In our numerical experiments, even if the proposed effective boundary conditions lead to satisfactory results for  $\text{Ra}_L$  up to  $10^8$  (*cf.* section (II.3.3)), it will be interesting to assess the validity of this decoupling assumption on more difficult problems.

Thanks to the previous decoupling assumption, the momentum and heat transfer problems can be solved independently and the related effective conditions can also be treated independently.

### II.3.1 Momentum effective boundary condition

As stated previously, since the momentum and heat transfer problems can be solved independently, the building of the related effective conditions can also be treated independently and we begin here



with the momentum effective boundary condition. Discarding the buoyancy coupling term, the momentum transfer problem in  $\Omega_2$  is now given by

$$\rho (\mathbf{u}_2 \cdot \nabla) \mathbf{u}_2 + \nabla p_2 = \mu \nabla^2 \mathbf{u}_2 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.10a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_2 = 0 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.10b})$$

$$\mathbf{u}_2 = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.10c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-p_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{u}_2) = \mathbf{n}_0 \cdot (-p_1 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{u}_1) \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.10d})$$

$$\mathbf{u}_2 = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.10e})$$

Here, a momentum effective boundary condition is built in the frame of the approximation of the Dirichlet-to-Neumann operator (II.6a)-(II.6b). Such an approximation is based on estimates of the velocity and pressure fields  $(\mathbf{u}_2, p_2)$  in  $\Omega_2$  which rely on the resolution of local closure problems in a pseudo-periodic unit cell  $\Omega_i$ . To accomplish this, the first step consists in writing the micro-scale variables as sum of a macro-scale term (with  $\star_{1,2}$  quantities) which undergoes significant variations only over the large length scale  $L$  and a deviation term (with  $\tilde{\star}$  quantities) for which the associated dominant length scale is  $\ell$ . These spatial decompositions read

$$\mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_{1,2} + \tilde{\mathbf{u}}_2 \quad (\text{II.11a})$$

$$p_2 = p_{1,2} + \tilde{p}_2 \quad (\text{II.11b})$$

At this stage, the macro-scale terms  $\mathbf{u}_{1,2}$  and  $p_{1,2}$  remain to be defined in the sub-domain  $\Omega_2$ . Here, they are approximated by the following Taylor expansions in the normal direction to the fictitious surface  $\Gamma_0$

$$\mathbf{u}_{1,2} = \mathbf{u}_{1,0} + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \quad (\text{II.12a})$$

$$p_{1,2} = p_{1,0} + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k p_{1,0} \quad (\text{II.12b})$$

where the subscript  $\star_{1,0}$  denote the spatial restriction of the fields  $(\mathbf{u}_1, p_1)$  on  $\Gamma_0$ . These approximations have to be compared to the meso-scale modeling introduced by Ochoa-Tapia and Whitaker [119] or Jamet and Chandesris [38] for the development of effective boundary conditions between a porous medium and a free fluid region. To be explicit about this analogy, the estimate of the macro-scale terms in  $\Omega_2$ ,  $\mathbf{u}_{1,2}$  and  $p_{1,2}$  defined by (II.12) or  $T_{1,2}$  introduced later in (II.43) for the heat transfer problem, can be viewed as the meso-scale fields introduced in [38] where the sub-domains  $\Omega_1$  and  $\Omega_2$  play respectively the role of the homogeneous free fluid region and the heterogeneous transition region. Here, the meso-scale fields are simply given by a Taylor expansion from the coupling surface rather than satisfying a boundary value problem with highly varying coefficients. The dimensionless form of the relationships (II.12) ( $\star^+$  quantities) is given by

$$\mathbf{u}_{1,2}^+ \sim \mathbf{u}_{1,0}^+ + \sum_{k \geq 0} \epsilon^k \frac{y^{k+}}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0}^+ \quad (\text{II.13a})$$

$$p_{1,2}^+ \sim p_{1,0}^+ + \sum_{k \geq 0} \epsilon^k \frac{y^{k+}}{k!} \partial_y^k p_{1,0}^+ \quad (\text{II.13b})$$

Under the dimensionless form, these approximations may be seen as asymptotic expansions in which  $\epsilon = \ell/L$  acts as the small parameter [3]. As a consequence, we will adopt the terminology



used in [3] associating the order of the effective conditions with the small parameter  $\epsilon$ . Now, the estimates (II.11) together with (II.12) are substituted in (II.10) yielding

$$\begin{aligned} & \rho \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) \cdot \nabla \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + \rho \mathbf{u}_{1,0} \cdot \nabla \mathbf{u}_{1,0} + \\ & \rho y \mathbf{u}_{1,0} \cdot \nabla (\partial_y \mathbf{u}_{1,0}) + \rho \mathbf{u}_{1,0} \cdot \nabla \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + \nabla p_{1,0} + y \partial_x \partial_y p_{1,0} \mathbf{e}_1 + \\ & \nabla \left( \tilde{p}_2 + \sum_{k \geq 2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k p_{1,0} \right) = \mu \nabla^2 \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + y \partial_y \mathbf{u}_{1,0} + \sum_{k \geq 3} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + \mu \nabla^2 \mathbf{u}_{1,0} \\ & \quad + \mu \frac{y^2}{2} \partial_{xx}^2 \partial_{yy}^2 \mathbf{u}_{1,0} \text{ in } \Omega_2 \end{aligned} \quad (\text{II.14a})$$

$$\nabla \cdot \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) = 0 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.14b})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.14c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-\tilde{p}_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \tilde{\mathbf{u}}_2) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.14d})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.14e})$$

where  $\mathbf{e}_1 = (1, 0)^T$  in Eq.(II.14b). Then, since the Navier-Stokes equations Eqs.(II.4a)-(II.4b) are satisfied on the fictitious surface  $\Gamma_0$ , we can write the boundary value problem (II.14) as

$$\begin{aligned} & \rho \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) \cdot \nabla \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + \rho y \mathbf{u}_{1,0} \cdot \nabla (\partial_y \mathbf{u}_{1,0}) + \\ & + \rho \mathbf{u}_{1,0} \cdot \nabla \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + y \partial_x \partial_y p_{1,0} \mathbf{e}_1 + \nabla \left( \tilde{p}_2 + \sum_{k \geq 2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k p_{1,0} \right) \\ & = \mu \nabla^2 \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + y \partial_y \mathbf{u}_{1,0} + \sum_{k \geq 3} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + \mu \frac{y^2}{2} \partial_{xx}^2 \partial_{yy}^2 \mathbf{u}_{1,0} \text{ in } \Omega_2 \end{aligned} \quad (\text{II.15a})$$

$$\nabla \cdot \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) = 0 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.15b})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.15c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-\tilde{p}_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \tilde{\mathbf{u}}_2) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.15d})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.15e})$$

This result can be simplified by estimating the order of magnitude of its different terms. With this objective, the order of magnitude of the spatial deviations have to be estimated. The key to this estimation are the boundary conditions given by Eqs.(II.15c)-(II.15d). Keeping in mind that the

length scales associated with the spatial deviations and the macro-scale terms are respectively  $\ell$  and  $L$ , the boundary condition (II.15c) suggests

$$\mathcal{O}(\tilde{\mathbf{u}}_2) \sim \mathcal{O}(\mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.16})$$

No precise estimate is available for  $\mathbf{u}_{1,0}$ . However, if we assume that the coupling surface is well contained in the laminar boundary layer, we can adopt the following rough estimate

$$\mathcal{O}(\mathbf{u}_{1,0}) \sim \mathcal{O}(\epsilon U) \quad (\text{II.17})$$

where we recall that  $U$  is the magnitude of the macro-scale velocity. This rough estimate immediately leads to  $\mathcal{O}(\tilde{\mathbf{u}}_2) \sim \mathcal{O}(\epsilon U)$ . Then, by using this latter estimate together with (II.15d), we obtain

$$\mathcal{O}(\tilde{p}_2) \sim \mathcal{O}\left(\mu \frac{\epsilon U}{\ell}\right) \sim \mathcal{O}\left(\rho \frac{\epsilon^2 U^2}{\text{Re}_\ell}\right) \quad (\text{II.18})$$

where  $\text{Re}_\ell$  is the micro-scale Reynolds number defined by  $\text{Re}_\ell = \rho \epsilon U \ell / \mu$ . At this stage, it is more convenient to write the dimensionless form of the boundary value problem (II.15) in order to make further simplifications. On the basis of the previous estimates, one finds

$$\begin{aligned} & \text{Re}_\ell \epsilon \rho \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 1} \epsilon^k \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) \cdot \nabla \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \epsilon^{k+1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + \text{Re}_\ell \epsilon^2 \rho y \mathbf{u}_{1,0} \cdot \nabla (\partial_y \mathbf{u}_{1,0}) + \\ & + \text{Re}_\ell \epsilon \rho \mathbf{u}_{1,0} \cdot \nabla \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 2} \epsilon^{k+1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + \epsilon^3 y \partial_x \partial_y p_{1,0} \mathbf{e}_1 + \nabla \left( \epsilon \tilde{p}_2 + \sum_{k \geq 2} \epsilon^{k+2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k p_{1,0} \right) \\ & = \nabla^2 \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \epsilon^3 y \partial_y \mathbf{u}_{1,0} + \sum_{k \geq 3} \epsilon^{k+2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) + \epsilon^4 \frac{y^2}{2} \partial_{xx}^2 \partial_{yy}^2 \mathbf{u}_{1,0} \quad \text{in } \Omega_2 \end{aligned} \quad (\text{II.19a})$$

$$\nabla \cdot \left( \tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \epsilon^k \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} \right) = 0 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.19b})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \epsilon^k \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.19c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-\tilde{p}_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \tilde{\mathbf{u}}_2) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.19d})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 + \sum_{k \geq 0} \epsilon^k \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \mathbf{u}_{1,0} = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.19e})$$

where the superscript  $+$  have been omitted in order to simplify the notations. The relationship between the micro-scale Reynolds number  $\text{Re}_\ell$  and the macro-scale one  $\text{Re}_L$  (defined by (II.3)) is given by

$$\text{Re}_\ell \sim \epsilon^2 \text{Re}_L \quad (\text{II.20})$$

Since the roughnesses are assumed to be small compared to the boundary layer thickness, one can write

$$\text{Re}_L \ll \epsilon^{-2} \quad (\text{II.21})$$

Then, by substituting this estimate in (II.20) one obtains

$$\text{Re}_\ell \ll 1 \quad (\text{II.22})$$

We are concerned here in building a first-order approximation. Under these circumstances, all the terms of order  $\mathcal{O}(\epsilon^k)$  with  $k \geq 2$  can be discarded in the equations (II.19) as, for instance, inertia terms. We emphasize that such a simplification is possible provided that the estimate (II.21) is satisfied. Indeed, since the viscous boundary layer thickness decreases when the macro-scale Reynolds number increases, the estimate given by (II.21) may be questionable for high values of  $\text{Re}_L$ . In this case, inertia terms such as for example  $\tilde{\mathbf{u}}_2 \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}}_2$  cannot be neglected anymore. Thereby, the PDEs system (II.19) boils down to a Stokes-like problem which is written below in dimensional form

$$\nabla \tilde{p}_2 = \mu \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}_2 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.23a})$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_2 = 0 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.23b})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 = -\mathbf{u}_{1,0} - y \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.23c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-\tilde{p}_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \tilde{\mathbf{u}}_2) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.23d})$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 + \mathbf{u}_{1,0} + y \partial_y \mathbf{u}_{1,0} = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.23e})$$

The computation of this boundary value problem appears again to be a costly numerical task as it consists in a coupled *micro macro*-scale problem for both the spatial deviations and the macro-scale contributions  $\mathbf{u}_{1,0}$  and  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$ . Following [127], these macro-scale contributions may be viewed as source terms which act as generators of the spatial deviation velocity  $\tilde{\mathbf{u}}_2$  and the spatial deviation pressure  $\tilde{p}_2$  in  $\Omega_2$ . Then, given the nature of these coupled equations, we propose to construct an approximate solution. Neglecting the influence of  $\mathcal{G}(x, y)$  in (II.23e), one can show that the spatial deviations are zero when the source terms  $\mathbf{u}_{1,0}$  and  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$  are zero. This encourages us to represent the spatial deviations in terms of the macro-scale source terms according to

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mathbf{B} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \quad (\text{II.24a})$$

$$\tilde{p}_2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mathbf{b} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \quad (\text{II.24b})$$

where  $(\mathbf{A}, \mathbf{a})$  and  $(\mathbf{B}, \mathbf{b})$  refer to the closure variables or the mapping variables that realize an approximate solution of the *micro macro*-scale problem (II.23). The closure variables  $(\mathbf{A}, \mathbf{a})$  and  $(\mathbf{B}, \mathbf{b})$  are solution of two boundary value problems, or closure problems. In practice, these closure problems are solved over a pseudo-periodic representative unit cell  $\Omega_i$  (*cf.* Fig.III.2) with periodicity conditions for closure variables as in closure problems obtained from the volume averaging method for the macro-scale description of transport phenomena in porous media (*e.g.* [127]). These periodicity conditions are justified because the boundary condition Eq.(II.23e) can only have an influence in a region of thickness of the order of  $\ell$  near the side surfaces. Moreover the roughnesses are assumed to be contained in the viscous boundary layer and thus, the variations of  $\mathbf{u}_{1,0}$  in the transverse  $x$ -direction are negligible compare to the one in the vertical  $y$ -direction. In other words, this means that the coupling surface must be contained in the viscous boundary layer in order for the periodicity conditions to be satisfied. Here, it is important to mention that the periodicity assumption for the closure variables does not imply that the macro-scale terms are periodic on the coupling surface. Under these circumstances, the closure problems are given by

- **Problem I.**  $\mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla \mathbf{a} = \mu \nabla^2 \mathbf{A} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.25a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.25b})$$

$$\mathbf{A} = -\mathbf{I} \quad \text{on } \Gamma_{w_i} \quad (\text{II.25c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{a} \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{A}) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} \quad (\text{II.25d})$$

$$\mathbf{A}(x) = \mathbf{A}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.25e})$$

$$\mathbf{a}(x) = \mathbf{a}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.25f})$$

- **Problem II.**  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla \mathbf{b} = \mu \nabla^2 \mathbf{B} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.26a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.26b})$$

$$\mathbf{B} = -y \mathbf{I} \quad \text{on } \Gamma_{w_i} \quad (\text{II.26c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{b} \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{B}) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} \quad (\text{II.26d})$$

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.26e})$$

$$\mathbf{b}(x) = \mathbf{b}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.26f})$$

The derivation of these two closure problems is given in Appendix (II.3.A). At this stage, it is interesting to remark that the equations (II.25) and (II.26) suggest the following estimates

$$\mathcal{O}(\mathbf{A}) \sim \mathcal{O}(1) \quad ; \quad \mathcal{O}(\mathbf{B}) \sim \mathcal{O}(\ell) \quad (\text{II.27a})$$

$$\mathcal{O}(\mathbf{a}) \sim \mathcal{O}\left(\frac{\mu}{\ell}\right) \quad ; \quad \mathcal{O}(\mathbf{b}) \sim \mathcal{O}(\mu) \quad (\text{II.27b})$$

This will be used later to obtain a useful form of the effective boundary conditions.

At this point of the analysis, we follow the procedure used by Whitaker [152] to obtain more convenient forms of the problems **I** and **II**. This consists in doing the scalar product of the closure variables with an arbitrary unit vector. In our case,  $\mathbf{e}_1 = (1, 0)^T$  and  $\mathbf{e}_2 = (0, 1)^T$  are chosen as unit vectors. This results in four closure problems in the form of Stokes' problem. These problems are listed below.

- **Problem I.1.**  $\mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla a_1 = \mu \nabla \mathbf{A}_1 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.28a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A}_1 = 0 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.28b})$$

$$\mathbf{A}_1 = -\mathbf{e}_1 \quad \text{on } \Gamma_{w_i} \quad (\text{II.28c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-a_1 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{A}_1) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} \quad (\text{II.28d})$$

$$\mathbf{A}_1(x) = \mathbf{A}_1(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.28e})$$

$$a_1(x) = a_1(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.28f})$$

- **Problem II.1.**  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla b_1 = \mu \nabla^2 \mathbf{B}_1 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.29a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_1 = 0 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.29b})$$

$$\mathbf{B}_1 = -y \mathbf{e}_1 \quad \text{on } \Gamma_{w_i} \quad (\text{II.29c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-b_1 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{B}_1) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} \quad (\text{II.29d})$$

$$\mathbf{B}_1(x) = \mathbf{B}_1(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.29e})$$

$$b_1(x) = b_1(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.29f})$$

- **Problem I.2.**  $\mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla a_2 = \mu \nabla \mathbf{A}_2 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.30a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A}_2 = 0 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.30b})$$

$$\mathbf{A}_2(x) = -\mathbf{e}_2 \quad \text{on } \Gamma_{w_i} \quad (\text{II.30c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-a_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{A}_2) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} \quad (\text{II.30d})$$

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{A}_2(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.30e})$$

$$a_2(x) = a_2(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.30f})$$

- **Problem II.2.**  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla b_2 = \mu \nabla^2 \mathbf{B}_2 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.31a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_2 = 0 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.31b})$$

$$\mathbf{B}_2 = -y \mathbf{e}_2 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.31c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-b_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{B}_2) = \mathbf{0} \quad \text{in } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.31d})$$

$$\mathbf{B}_2(x) = \mathbf{B}_2(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.31e})$$

$$b_2(x) = b_2(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.31f})$$

where the notations  $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2)^T$ ,  $\mathbf{B} = (\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2)^T$ ,  $\mathbf{a} = (a_1, a_2)^T$  and  $\mathbf{b} = (b_1, b_2)^T$  have been considered in the above systems. One can see that  $(\mathbf{A}_1, a_1) = (-\mathbf{e}_1, 0)$  and  $(\mathbf{A}_2, a_2) = (-\mathbf{e}_2, 0)$  are respectively the trivial solutions of the closure problems **I.1** and **I.2**. Hence,  $(\mathbf{A}, \mathbf{a}) = (-\mathbf{I}, 0)$  is the trivial solution of the closure problem **I**. As far as the problem **II** is concerned, there only exists a trivial solution in the smooth case which is given by  $(\mathbf{B}, \mathbf{b}) = (-\delta_0 \mathbf{I}, 0)$ .

At this point, on the basis of the estimates provided for the micro-scale velocity  $\mathbf{u}_2$  and the micro-scale pressure  $p_2$ , we are now in a position to obtain a closed form of the macro-scale problem for  $(\mathbf{u}_1, p_1)$  in  $\Omega_1$ . From the representations of spatial deviations given by (II.24) together with the trivial solution of the local closure problem **I**, the transmission boundary condition Eq.(II.6a) leads to the following first-order effective boundary condition

$$-\mu \mathbf{u}_{1,0} = -\mu \mathbf{B} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \quad (\text{II.32})$$

Introducing the notations  $\mathbf{B}_1 = (B_{11}, B_{12})^T$  and  $\mathbf{B}_2 = (B_{21}, B_{22})^T$ , the equation (II.32) takes the form

$$-\mu \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ v_{1,0} \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_{11} \partial_y u_{1,0} + B_{21} \partial_y v_{1,0} \\ B_{12} \partial_y u_{1,0} + B_{22} \partial_y v_{1,0} \end{pmatrix} \quad (\text{II.33})$$

where  $\mathbf{u}_{1,0} = (u_{1,0}, v_{1,0})^T$ . We focus now on the right hand side of (II.33) and we show that some simplifications can be done at the first-order approximation. Indeed, on the one hand, from the incompressibility condition (II.4b) and the expression of  $u_{1,0}$  given by (II.33) one can write

$$B_{21} \partial_y v_{1,0} = -B_{21} \partial_x (B_{11} \partial_y u_{1,0} + B_{21} \partial_y v_{1,0}) \quad (\text{II.34a})$$

$$B_{22} \partial_y v_{1,0} = -B_{22} \partial_x (B_{11} \partial_y u_{1,0} + B_{21} \partial_y v_{1,0}) \quad (\text{II.34b})$$

Since  $B_{12}$ ,  $B_{21}$  and  $B_{22}$  are of order  $\ell$  from (II.27a) and  $u_{1,0}$ ,  $v_{1,0}$  are of order  $\epsilon U$  from (II.17), the order of magnitude of the right hand side of (II.34) is given by

$$B_{21} \mathcal{O}(\partial_x (B_{12} \partial_y u_{1,0} + B_{21} \partial_y v_{1,0})) \sim \mathcal{O}(\epsilon^3 U) \quad (\text{II.35a})$$

$$B_{22} \mathcal{O}(\partial_x (B_{12} \partial_y u_{1,0} + B_{21} \partial_y v_{1,0})) \sim \mathcal{O}(\epsilon^3 U) \quad (\text{II.35b})$$

Thus, at the first-order approximation, the boundary condition (II.32) reads

$$-\mu \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ v_{1,0} \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_{11} \partial_y u_{1,0} \\ B_{12} \partial_y u_{1,0} \end{pmatrix} \quad (\text{II.36})$$

On the other hand, using the Stokes' theorem along with the boundary condition (II.29c) and the periodicity condition (II.29e), the incompressibility condition given by (II.29b) can be written as

$$\int_{\Gamma_{0i}} \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{B}_1 \, d\Gamma = \int_{\Gamma_{wi}} y \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_1 \, d\Gamma \quad (\text{II.37})$$

The right hand side of (II.37) can be expressed as

where  $\mathcal{D}_k$  is a closed curve as indicated in Fig.III.3. Thanks to the Cauchy's integral theorem, the right hand side of (II.38) becomes zero and the equation (II.37) reduces to

We recall the reader that the fictitious surface  $\Gamma_0$  is located sufficiently high above the heterogeneous one so that all perturbations caused by the roughnesses disappear. In other words, this means that the variations of the closure variables are negligible. Under these circumstances, by using (II.39) the closure variable  $B_{12}$  can be discarded in (II.36). Therefore, the first-order effective boundary condition given by (II.32) takes the form

$$v_{1,0} = 0 \quad (\text{II.40b})$$

This effective boundary condition corresponds to a Navier boundary condition in which  $C_f = -\mu/B_{11}$  corresponds to an *effective friction coefficient*. Given the roughness geometry, this effective coefficient is known from the solution of the local boundary value problem **II.1**. Here, one must note that the effective boundary condition (II.40) is similar to the one obtained at the first-order of approximation in [3, 11, 12, 114, 149].

### II.3.2 Heat effective boundary conditions

In this section, heat effective boundary conditions (with respect to BC1 and BC2 micro-scale conditions recalled below) are built in the frame of the approximation of the Dirichlet-to-Neumann operator Eqs.(II.6c)-(II.6d). We follow here the same procedure employed for the momentum problem. Hence, we seek an approximate solution based on estimates for the temperature field  $T_2$  in  $\Omega_2$  which rely on the resolution of local closure problems.

We recall here that the heat transfer problem has been uncoupled from the momentum one. Then, the micro-scale velocity  $\mathbf{u}_2$  is assumed to be known and the boundary value problem for  $T_2$

in  $\Omega_2$  reads

$$\mathbf{u}_2 \cdot \nabla T_2 = \kappa \nabla^2 T_2 \quad \text{in } \Omega_2 \quad (\text{II.41a})$$

$$(\text{BC1}) \quad T_2 = T_w \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.41b})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla T_2 = 0 \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.41c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-\kappa \nabla T_2) = \mathbf{n}_0 \cdot (-\kappa \nabla T_1) \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.41d})$$

$$T_2 = \mathcal{H}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.41e})$$

As previously, we first write the temperature  $T_2$  as a sum of a macro-scale contribution  $T_{1,2}$  and a micro-scale deviation  $\tilde{T}_2$  as

$$T_2 = T_{1,2} + \tilde{T}_2 \quad (\text{II.42})$$

The macro-scale temperature  $T_{1,2}$  is estimated in  $\Omega_2$  through the following Taylor expansion in the normal direction to the fictitious surface

$$T_{1,2} = T_{1,0} + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \quad (\text{II.43})$$

where the subscript  $\star_{1,0}$  denotes the spatial restriction of  $T_1$  on  $\Gamma_0$ . The use of the estimates given by (II.42) and (II.43) in (II.41) leads to the following boundary value problem

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_2 \cdot \nabla \left( \tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) + y \partial_x \partial_y T_{1,0} \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{e}_1 &= \kappa \frac{y^2}{2} \partial_{xx}^2 \partial_{yy}^2 T_{1,0} \\ &+ \kappa \nabla^2 \left( \tilde{T}_2 + y \partial_y T_{1,0} + \sum_{k \geq 3} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) \quad \text{in } \Omega_2 \end{aligned} \quad (\text{II.44a})$$

$$(\text{BC1}) \quad \tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} = T_w \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.44b})$$

$$\begin{aligned} (\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \left( \tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) + \mathbf{n} \cdot \nabla T_{1,0} \\ + y \partial_x \partial_y T_{1,0} = 0 \quad \text{on } \Gamma_w \end{aligned} \quad (\text{II.44c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-\kappa \nabla \tilde{T}_2) = 0 \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.44d})$$

$$\tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} = \mathcal{H}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.44e})$$

Hereabove, (II.44a) has been simplified because (II.41a) is also satisfied on the fictitious surface  $\Gamma_0$ . Further simplifications can be done by estimating the order of magnitude of the different terms of the boundary value problem (II.44). The order of magnitude of the spatial deviation temperature is required to make a scaling analysis of the equations (II.44). The boundary conditions Eqs.(II.44b)-(II.44c) suggest the following estimates

$$(\text{BC1}) \quad \mathcal{O}(\tilde{T}_2) \sim \mathcal{O}(T_{1,0} - T_w) \quad (\text{II.45a})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathcal{O}(\tilde{T}_2) \sim \mathcal{O}(\epsilon T_{1,0}) \quad (\text{II.45b})$$

where we recall that  $\epsilon = \ell/L$ . In this study, we choose the most restricting estimate which is clearly given by (II.45a) since the following relationship is always satisfied

$$\mathcal{O}(\epsilon T_{1,0}) \ll \mathcal{O}(T_{1,0} - T_w) \quad (\text{II.46})$$



At this stage, we are in a position to make the scaling analysis of the equations (II.41) on the basis of these estimates. The dimensionless form of the boundary value problem given by (II.44) reads

$$\begin{aligned} \text{Pe}_\ell \mathbf{u}_2 \cdot \nabla \left( \tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 2} \epsilon^{k+1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) + \text{Pe}_\ell \epsilon^2 y \partial_x \partial_y T_{1,0} \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{e}_1 = \\ \epsilon^4 \frac{y^2}{2} \partial_{xx}^2 \partial_{yy}^2 T_{1,0} + \nabla^2 \left( \tilde{T}_2 + \epsilon^3 y \partial_y T_{1,0} + \sum_{k \geq 3} \epsilon^{k+2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) \text{ in } \Omega_2 \end{aligned} \quad (\text{II.47a})$$

$$(\text{BC1}) \quad \tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 0} \epsilon^k \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} = T_w \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.47b})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \left( \tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 2} \epsilon^{k+1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) + \epsilon \mathbf{n} \cdot \nabla T_{1,0} + \epsilon^2 y \partial_x \partial_y T_{1,0} = 0 \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.47c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot \left( -\kappa \nabla \tilde{T}_2 \right) = 0 \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.47d})$$

$$\tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 0} \epsilon^k \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} = \mathcal{H}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.47e})$$

where the superscript  $+$  have been omitted in order to simplify the notations. In the equation (II.47a),  $\text{Pe}_\ell$  is the micro-scale Péclet number defined by  $\text{Pe}_\ell = U\ell/\kappa$  and linked to the macro-scale one (*cf.* (II.3)) by

$$\text{Pe}_\ell \sim \epsilon \text{Pe}_L \quad (\text{II.48})$$

Then, since the roughnesses are assumed to be small compared to the boundary layer thickness, one can write

$$\text{Pe}_L \ll \epsilon^{-2} \quad (\text{II.49})$$

The use of this result together with (II.48) leads to the following estimate

$$\text{Pe}_\ell \ll \epsilon^{-1} \quad (\text{II.50})$$

From this estimate, the terms of order  $\mathcal{O}(\epsilon^k)$  with  $k \geq 2$  are neglected in the equations (II.47). As a consequence, under dimensional form, the first-order boundary value problem for the spatial deviation temperature is given by

$$\mathbf{u}_2 \cdot \nabla \tilde{T}_2 = \kappa \nabla^2 \tilde{T}_2 \text{ in } \Omega_2 \quad (\text{II.51a})$$

$$(\text{BC1}) \quad \tilde{T}_2 + T_{1,0} + y \partial_y T_{1,0} = T_w \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.51b})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \tilde{T}_2 + \mathbf{n} \cdot \nabla T_{1,0} = 0 \quad \text{on } \Gamma_w \quad (\text{II.51c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot \left( -\kappa \nabla \tilde{T}_2 \right) = 0 \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (\text{II.51d})$$

$$\tilde{T}_2 + T_{1,0} + \epsilon y \partial_y T_{1,0} = \mathcal{H}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad (\text{II.51e})$$

Here again, given the nature of this *micro macro*-scale problem for both the spatial deviation temperature and the two macro-scale terms  $(T_w - T_{1,0})$  and  $\partial_y T_{1,0}$ , we seek an approximate solution of the spatial deviation temperature  $\tilde{T}_2$ . As previously, if the influence of  $\mathcal{H}(x, y)$  in (II.51e) is neglected, the spatial deviation temperature is zero when the macro-scale source terms are zero. This motivates us to represent the spatial deviation temperature in terms of  $(T_w - T_{1,0})$  and  $\partial_y T_{1,0}$  according to

$$\tilde{T}_2 = c(T_w - T_{1,0}) + d \partial_y T_{1,0} \quad (\text{II.52})$$

where  $c$  and  $d$  refer to the closure variables or the mapping variables that realize an approximate solution of the problem (II.51). These variables are solutions of the closure problems **III** and **IV** that have to be solved over a representative unit cell  $\Omega_i$  with periodicity conditions. These two closure problems are given below and we refer the reader to Appendix (II.3.B) for their derivation.

- **Problem III.**  $(T_{1,0} - T_w)$  mapping

$$\mathbf{u}_2 \cdot \nabla c = \kappa \nabla^2 c \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.53a})$$

$$(\text{BC1}) \quad c = 1 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.53b})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla c = 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.53c})$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla c = 0 \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.53d})$$

$$c(x) = c(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.53e})$$

- **Problem IV.**  $\partial_y T_{1,0}$  mapping

$$\mathbf{u}_2 \cdot \nabla d = \kappa \nabla^2 d \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.54a})$$

$$(\text{BC1}) \quad d = -y \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.54b})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla d = -\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{e}_2 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.54c})$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla d = 0 \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.54d})$$

$$d(x) = d(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.54e})$$

Only the closure problem **IV** needs to be solved because  $c = 1$  or  $c = 0$  are respectively the trivial solutions of the closure problem **III** in the case (BC1) or (BC2).

As previously discussed, the use of periodic conditions is justified as the boundary condition Eq.(II.51e) can only have an influence in a region of thickness of the order of  $\ell$  near the side surfaces. Moreover, as the roughnesses are assumed to be contained in the thermal boundary layer, the variations of  $T_{1,0}$  in the transverse  $x$ -direction are negligible compare to the one in the vertical  $y$ -direction. Here again, this means that the effective surface must be contained in the thermal boundary layer in order for the periodicity assumption to be justified. We recall the reader that this periodicity assumption for the closure variables does not imply that the macro-scale temperature is periodic on the coupling surface.

At this stage and on the basis of the estimates of the temperature field  $T_2$  in  $\Omega_2$ , we are now in a position to obtain a closed form of the heat transfer problem for  $T_1$  in  $\Omega_1$ . From the representation of the spatial deviation temperature given by (II.52) along with the trivial solution of the closure problem **III**, the transmission condition (II.6c) leads to the following first-order effective boundary conditions

$$(\text{BC1}) \quad -\mathbf{n}_0 \cdot \kappa \nabla T_{1,0} = h (T_{1,0} - T_w) \quad (\text{II.55a})$$

$$(\text{BC2}) \quad -\mathbf{n}_0 \cdot \kappa \nabla T_{1,0} = 0 \quad (\text{II.55b})$$

In the case (BC1), the effective boundary condition corresponds to a Robin boundary condition where  $h = -\kappa/d$  is an effective heat transfer coefficient. As far as the case (BC2) is concerned, a Neumann homogeneous boundary condition is conserved. Here again, given the roughness geometry, the effective heat transfer coefficient is known from the solution of the local boundary value problem **IV** provided that the micro-scale velocity to be known. This will be illustrated in the next section.

### II.3.3 Application to a natural convection problem in a stamp shaped cavity

We propose in this section to assess the validity of the proposed effective boundary conditions through numerical experiments. As in [3] or [149], these numerical experiments consist in comparing DNSs calculations taking the roughness geometry into account with effective calculations using the concept of an effective surface.

The problem under consideration has received considerable attention in the case of a square cavity (*e.g.* [45, 107, 108]) or a porous cavity (*e.g.* [71]) and consists in a two-dimensional problem of natural convection in a differentially heated cavity with rough boundaries. As illustrated in Fig.II.4, the heterogeneous surface  $\Gamma_w$  of this stamp cavity has a sinusoidal structure with (arbitrarily) an amplitude  $\mathcal{A} = 0.03$  and a period  $\mathcal{P} = 1/14.5$ . Each of the four sinusoidal surfaces have been numerically described by 580 points (*cf.* Fig.II.5). The horizontal boundaries are adiabatic while the vertical boundaries are kept isothermal with the left side at hot temperature  $T_h$  and the right side at cold temperature  $T_c$ . A no-slip boundary condition is prescribed everywhere. Here, it is interesting to remark that this natural convection problem collects all boundary conditions allowing us to validate the overall effective conditions previously developed. The Prandtl number is set to be 0.71 in overall calculations which are performed over the range  $10^4 \leq \text{Ra}_L \leq 10^8$ . These and the remain parameters used herein are summarized in Tab.III.1.

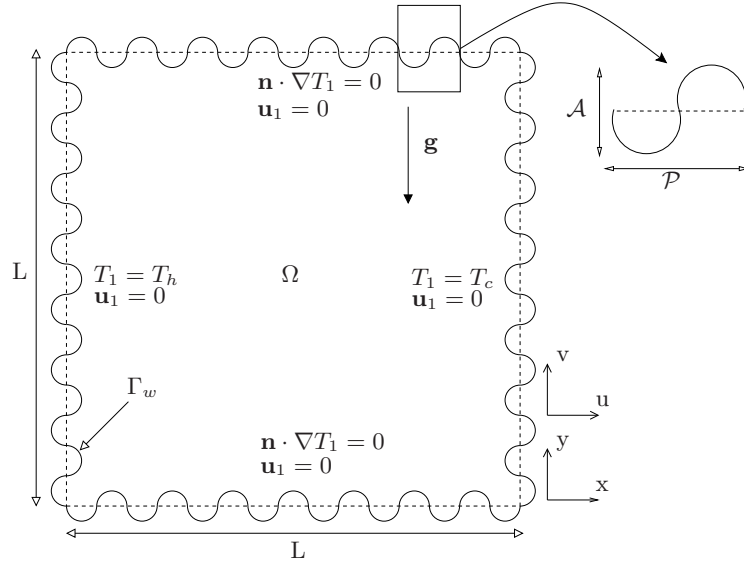


Figure II.4: Schematic representation of the computational domain  $\Omega = [0, L] \times [0, L]$

$L$	$\rho$	$\mu$	$\kappa$	$T_h$	$T_c$	$\beta$	Pr	$\text{Ra}_L$
1	1	Pr	1	1	0	$\mu^2 \text{Ra}_L / \ \mathbf{g}\  (T_h - T_c) L^3 \text{Pr}$	0.71	$10^3, \dots, 10^8$

Table II.1: Summary of physical parameters used for all numerical experiments

The calculations have been performed by using an application of the object-oriented software component library PELICANS developed at the French “Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire” [1]. The time discretization corresponds to a splitting algorithm which consists in solving sequentially the temperature and the Navier-Stokes equations until steady state. The resolution of the Navier-Stokes equations has been done by using an incremental projection method. The spatial discretization corresponds to a standard finite element approximation with inf-sup stable quadratic-linear elements  $\mathbb{Q}_2/\mathbb{Q}_1$  for the velocity-pressure problem and quadratic elements for the

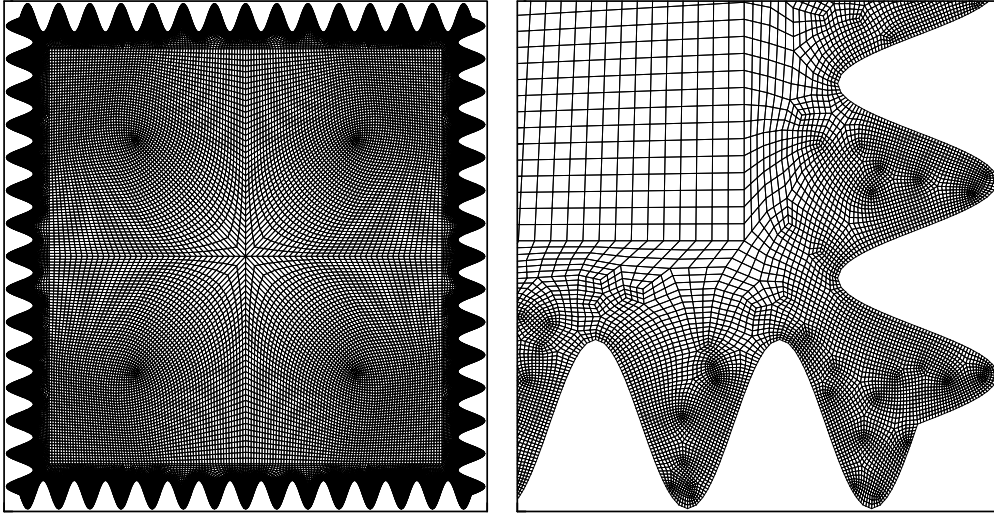


Figure II.5: Thinnest mesh used in the rough case

temperature. The fully discrete numerical scheme is described elsewhere and we refer the reader to [77, 92] for a detailed presentation.

For this kind of problem (*e.g.* [45, 107, 108]), the quantities of interest are the velocity and temperature profiles along the side walls and the averaged Nusselt number  $\langle \text{Nu} \rangle$  given by

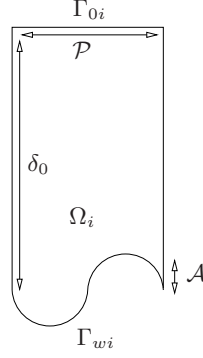
$$\langle \text{Nu} \rangle = \int_{\Gamma} \kappa \frac{\partial T_1}{\partial n} ds \quad (\text{II.56})$$

In this paper, the Nusselt numbers have been calculated with the method proposed in [15] and all the results have been obtained after a grid refinement study (*cf.* Tab.II.4 for the maximum degree of freedoms involved in the numerical experiments).

### II.3.4 Determination of the effective properties

In this section, we focus on the determination of the effective friction coefficient  $C_f$  and the effective heat transfer coefficient  $h$  by solving the closure problems **II.1** and **IV**. As previously mentioned, these closure problems are solved over a pseudo-periodic representative unit cell  $\Omega_i$ . Given the periodic structure of the rough boundary  $\Gamma_w$ , a period of  $\Gamma_w$  is chosen as representative pattern for  $\Omega_i$  (*cf.* Fig.II.6). The upper surface,  $\Gamma_{0i}$ , is located at a distance  $\delta_0 = 0.2$ . Fig.II.7 represents the variation of the ratio  $C_f(\delta_0) = -\mu/B_{11}(\delta_0)$  over  $C_f(y) = -\mu/B_{11}(y)$  with  $B_{11}(\delta_0) = -0.17480$  and the one of the ratio  $h(\delta_0) = -\kappa/d(\delta_0)$  over  $h(y) = -\kappa/d(y)$  for different micro-scale Reynolds number  $\text{Re}_\ell$  and  $\text{Pr} = 1$ . As expected, the results presented in Fig.II.7 show that the effective friction coefficient and the effective heat transfer coefficient converge toward asymptotic values on  $\Gamma_{0i}$ . As far as the effective heat transfer coefficient is concerned, tests with  $\text{Pr} = 0.5, 2, 5$  lead to the same conclusion.

Now, we focus on the impact of the flow properties on the effective coefficients. Given the nature of the closure problem **II.1** in which the viscosity  $\mu$  acts only as a scaling of the closure variable  $b_1$ , it is clear that the effective friction coefficient (or equivalently  $B_{11}$ ) does not depend on the flow properties but only on the geometry of the roughness. As a result, the asymptotic value  $C_f(\delta_0)$  will be used to perform effective calculations. Another interesting remark concerns the quantity  $\delta_0 + B_{11}(\delta_0)$ . The different results presented in Fig.II.8 show that  $\delta_0 + B_{11}(\delta_0)$  converges toward an asymptotic value given by  $L_1 = 0.025021$  when  $\Gamma_{0i}$  is located sufficiently high in order


 Figure II.6: Pseudo-periodic representative unit cell  $\Omega_i$ 

for the variation of the closure variables to vanish. We will see later that  $L_1$  may be viewed as an effective stick-slip length for which the effective condition degenerates into a no-slip boundary condition.

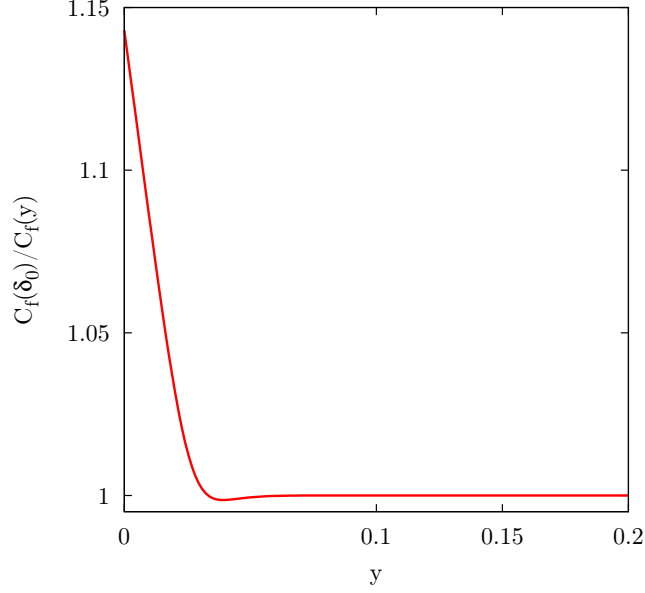
We propose now to study the impact of the flow properties on the effective heat transfer coefficient  $h$ . At the micro-scale, the flow is characterized by the micro-scale Reynolds number  $\text{Re}_\ell$  which can also be written as  $\text{Re}_\ell = \rho\tau_\ell\ell^2/\mu^2$  where  $\tau_\ell$  is an imposed shear stress. In order to parametrize the impact of the flow properties on  $h$ , the couple  $(\text{Re}_\ell, \text{Pr})$  is considered. A similar study has been done by Veran *et al.* [149] in order to characterize the impact of the flow properties on the effective reactivity. Here, by analogy, the Prandtl number  $\text{Pr}$  plays the role of the Schmidt number. The starting point consists in solving the Navier-Stokes equation in  $\Omega_i$  with an imposed shear stress  $\tau_\ell$  on  $\Gamma_{0i}$  defined by  $\tau_\ell = \mu^2\text{Re}_\ell/\rho\ell^2$ . Then, the resulting velocity field  $\mathbf{u}_2$  is used to solve the closure problem **IV** for different values of the Prandtl number  $\text{Pr}$ . Finally, by doing this over a wide range of micro-scale Reynolds number  $\text{Re}_\ell$ , we obtain a tabulation of the effective heat transfer coefficient as  $h := h(\text{Re}_\ell, \text{Pr})$ . Fig.II.9 represents the evolution of the coefficient  $h$  versus  $\text{Re}_\ell$  for different Prandtl numbers  $\text{Pr}$  varying between 0.5 and 5. The results have been made dimensionless by the value in the purely diffusive case. They indicate that  $\text{Re}_\ell$  has no real impact on the effective heat transfer coefficient  $h$  except for high values (*i.e.*  $\text{Re}_\ell > 5 \cdot 10^2$  or equivalently  $\text{Re}_L > 5 \cdot 10^2/\epsilon^2$  with  $\epsilon = \mathcal{A}/L$ ). This trend can be explained by the fact that the roughnesses tend to decrease the velocity and thus increase the diffusive regime. For micro-scale Reynolds number  $\text{Re}_\ell < 5 \cdot 10^2$ , the effective heat transfer coefficient can be approximated by its value in the purely diffusive case with an error lower than two percent for Prandtl numbers  $\text{Pr} \leq 5$ . This value is given by  $h(0) = -\kappa/d(\delta_0)$  with  $d(\delta_0) = -0.179526$ . As illustrated in Fig.II.10, the contour lines of the closure variable  $d$  are no longer normal for high values of  $\text{Re}_\ell$ . Such cases correspond to some high macro-scale Reynolds number  $\text{Re}_L$  (*cf.* (II.20)) flows that imply a turbulent boundary layer for which the assumptions of the effective models previously developed are no longer valid. For the laminar natural convection problem under consideration, the macro-scale Reynolds number  $\text{Re}_L$  can be expressed in term of macro-scale Rayleigh number  $\text{Ra}_L$  as follows

$$\text{Re}_L \sim \frac{\sqrt{\text{Ra}_L}}{\text{Pr}} \quad (\text{II.57})$$

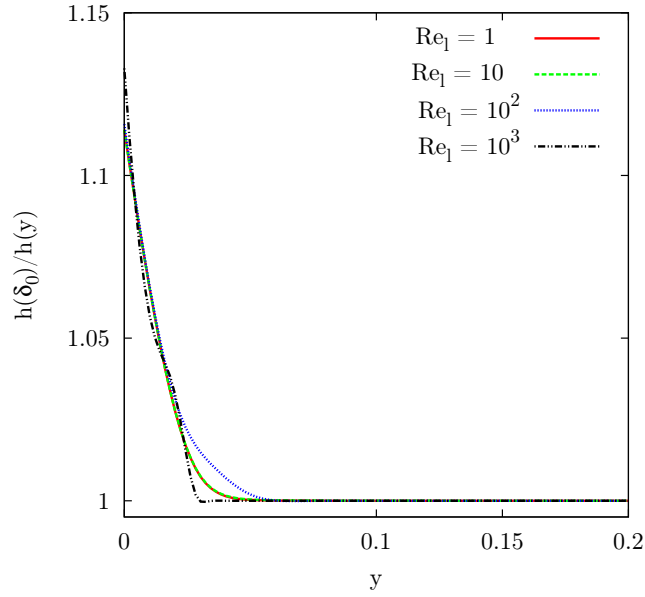
where we have used  $U = \kappa\sqrt{\text{Ra}_L}/L$  [122]. The relationship (II.57) can be written equivalently for the micro-scale Reynolds number  $\text{Re}_\ell$  as

$$\text{Re}_\ell \sim \epsilon^2 \frac{\sqrt{\text{Ra}_L}}{\text{Pr}} \sim \frac{\mathcal{A}^2}{L^2} \frac{\sqrt{\text{Ra}_L}}{\text{Pr}} \quad (\text{II.58})$$

In our case, since the highest value of  $\text{Ra}_L$  is set to be  $10^8$ , the relationship (II.58) leads to  $\text{Re}_\ell \sim 12, 5$ . Therefore, from the results presented in Fig.II.9, the effective heat transfer coefficient

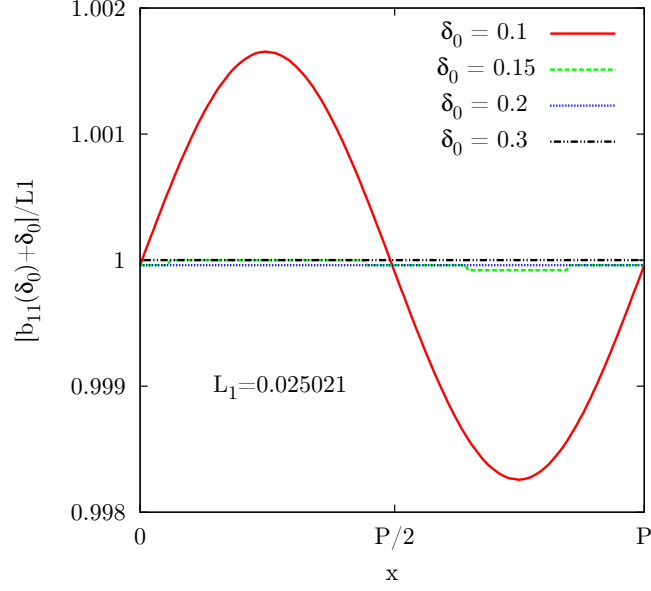


(a) Convergence of  $C_f(y)$  toward  $C_f(\delta_0)$ .

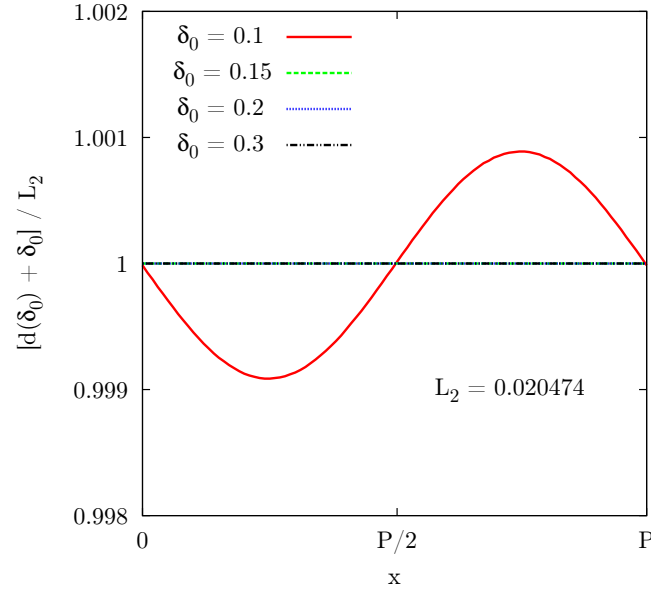


(b) Convergence of  $h(y)$  toward  $h(\delta_0)$ .

Figure II.7: Plot on  $x = \mathcal{P}/2$  of (a) the ratio  $C_f(\delta_0) = -\mu/B_{11}(\delta_0)$  over  $C_f(y) = -\mu/B_{11}(y)$  and (b) the ratio  $h(\delta_0) = -\kappa/d(\delta_0)$  over  $h(y) = -\kappa/d(y)$  for  $\text{Re}_\ell \in \{1, 10, 10^2, 10^3\}$  and  $\text{Pr} = 1$ , with  $\delta_0 = 0.2$ .



(a) Convergence of  $B_{11}(\delta_0) + \delta_0$  toward the effective length  $L_1 = 0.025021$ .



(b) Convergence of  $d(\delta_0) + \delta_0$  toward the effective length  $L_2 = 0.020474$ .

Figure II.8: Plot of (a) the quantity  $[B_{11}(\delta_0) + \delta_0]/L_1$  and (b)  $[d(\delta_0) + \delta_0]/L_2$  in the pure diffusive case (*i.e.*  $\text{Re}_\ell = 0$ ).



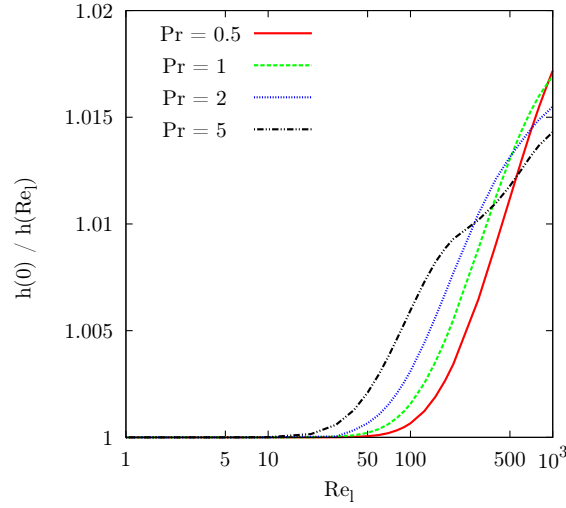


Figure II.9: Evolution of the ratio  $h(0)$  in the pure diffusive case over  $h(\text{Re}_\ell)$

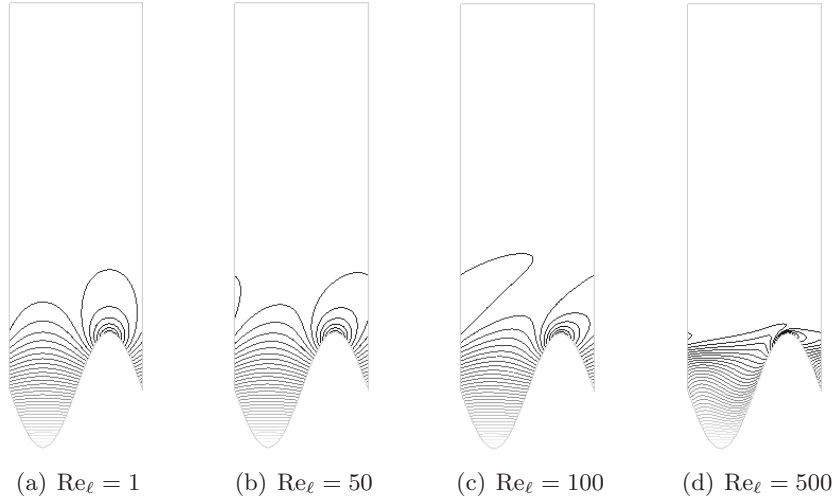


Figure II.10: Contour lines of the closure variable  $d$  for  $\text{Pr} = 1$ .

in the purely diffusive case  $h(0)$  appears to be a good estimate and then, it will be used in the following effective calculations.

As previously done for the momentum effective condition, the quantity  $\delta_0 + d(\delta_0)$  have also been investigated. The results presented in Fig.II.8 also show that  $\delta_0 + d(\delta_0)$  tends to an effective length given by  $L_2 = 0.020474$  for which we will see later that the Robin boundary condition boils down into a isothermal boundary condition.

### II.3.5 Effective calculations

This section is devoted to assess the validity of the effective conditions previously developed. Before performing effective numerical experiments, an interesting point is to prove that a specific treatment of the roughness effect is indeed necessary. To do so, we have performed direct numerical simulations in the stamp cavity (*cf.* Fig.II.11 (left) for  $\text{Ra}_L = 10^6$ ) and compared the results to the one obtained in a square cavity. As illustrated for instance in Fig.II.12 to Fig.II.14 for  $\text{Ra}_L = 10^6$ ,

### II.3. EFFECTIVE BOUNDARY CONDITIONS

the temperature and velocity profiles in the smooth case are very different from the one obtained in the rough case. The presence of the roughnesses tends to slow down the flow and enhance the heat transfer. Moreover, as shown in Tab.II.2, the averaged Nusselt numbers calculated on a hot rough surface for  $10^3 \leq \text{Ra}_L \leq 10^8$  is lesser than the one calculated on a flat surface (which are in good agreement with [107, 108]). This great impact of the roughnesses on the momentum and

$\text{Ra}_L$	$10^3$	$10^4$	$10^5$	$10^6$	$10^7$	$10^8$
$\langle \text{Nu}_r \rangle$	1.0888	2.1005	4.1607	7.9304	14.2904	25.4061
$\langle \text{Nu}_s \rangle$	1.1178	2.2448	4.5216	8.8252	16.5231	30.2247

Table II.2: Average Nusselt number calculated on the hot wall. Comparison between the smooth case ( $\star_s$  quantities) and the rough ( $\star_r$  quantities) case for  $10^3 \leq \text{Ra}_L \leq 10^8$ .

heat transfer for this laminar natural convection problem shows that a particular treatment of the roughnesses is necessary and then that the use of effective surface models is justified.

Throughout these tests, we have also numerically investigated the impact of the positioning of the coupling surface on the results. Actually, the optimal location, if any, of the coupling surface remains an open-question common with other up-scaling methods (*e.g.* [38] for heterogeneous porous media). This question has also a strong practical implication for numerical modeling.

The starting point of this study consists in defining an effective surface  $\Gamma_\delta$  located at a distance  $\delta$  from the coupling surface  $\Gamma_0$  (*cf.* Fig.II.15). In doing this, the effective boundary conditions given by (II.40) and (II.55) have to be defined on  $\Gamma_\delta$  to obtain a closed form of the boundary value problem in the effective domain  $\Omega_\delta$ . This is achieved by means of a Taylor expansion. For the momentum transfer problem, one can write

$$u_{1,0} = u_{1,\delta} - \sum_{k \geq 1} \delta^k \partial_y^k u_{1,\delta} \quad (\text{II.59a})$$

$$v_{1,0} = v_{1,\delta} - \sum_{k \geq 1} \delta^k \partial_y^k v_{1,\delta} \quad (\text{II.59b})$$

$$\partial_y u_{1,0} = \partial_y u_{1,\delta} - \sum_{k \geq 1} \delta^k \partial_y^{k+1} u_{1,\delta} \quad (\text{II.59c})$$

$$\partial_y v_{1,0} = \partial_y v_{1,\delta} - \sum_{k \geq 1} \delta^k \partial_y^{k+1} v_{1,\delta} \quad (\text{II.59d})$$

Then, by estimating the order of magnitude of these expansions, simplifications can be done at the first-order approximation to obtain

$$u_{1,0} = u_{1,\delta} - \delta \partial_y u_{1,\delta} \quad (\text{II.60a})$$

$$v_{1,0} = v_{1,\delta} \quad (\text{II.60b})$$

$$\partial_y u_{1,0} = \partial_y u_{1,\delta} \quad (\text{II.60c})$$

Finally, the use of these relationships in (II.40) leads to the following first-order effective boundary condition defined on  $\Gamma_\delta$

$$-\mu \partial_y u_{1,\delta} = C_{f,\delta} u_{1,\delta} \quad (\text{II.61a})$$

$$v_{1,\delta} = 0 \quad (\text{II.61b})$$

where  $C_{f,\delta} = -\mu/(B_{11} + \delta)$ . Here, two remarks can be done about this effective condition. On the one hand, the effective friction coefficient  $C_{f,\delta}$  tends to infinity when  $\delta$  tends to  $-B_{11}$ . This

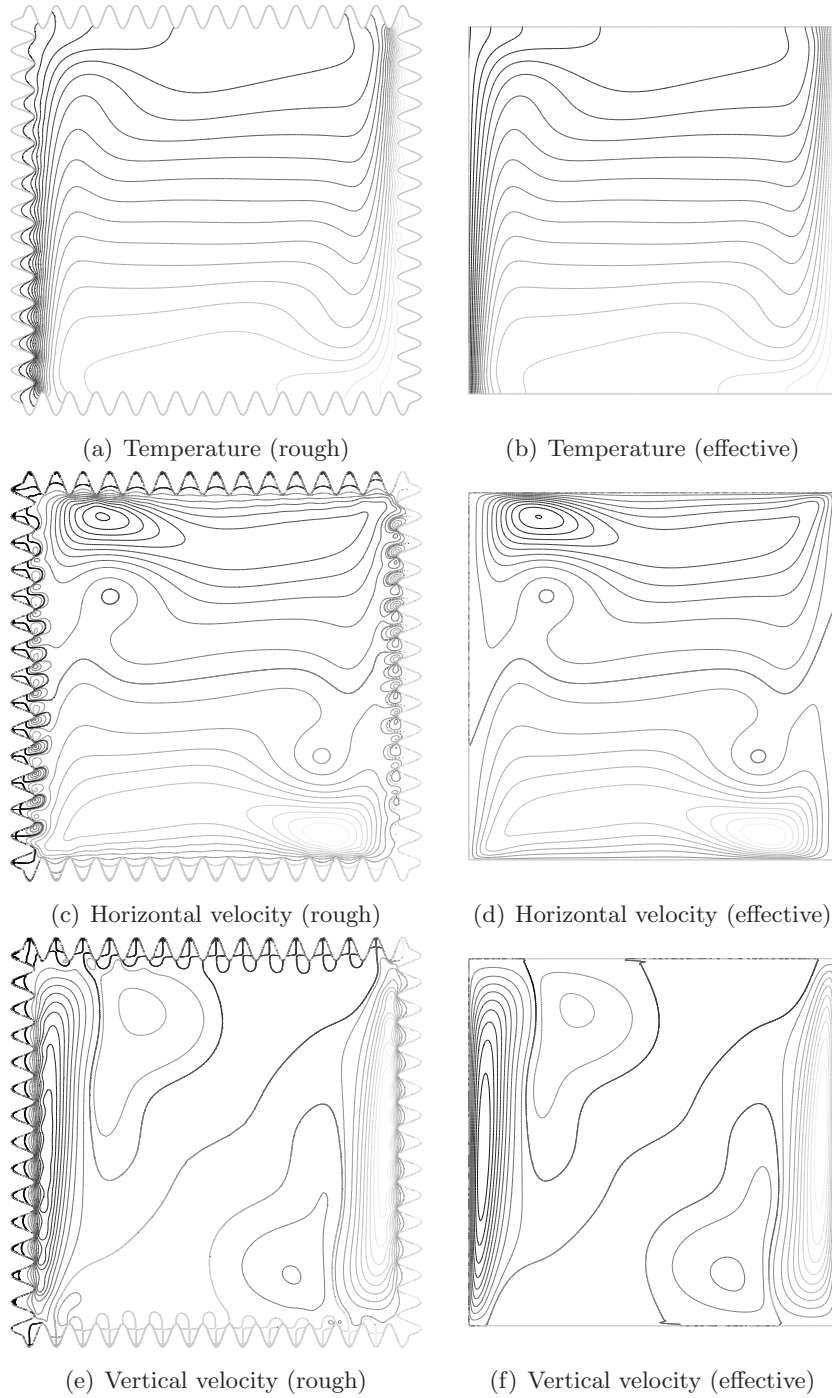


Figure II.11: Comparison of the contour lines of the temperature and the velocity fields in the rough (left) and effective no-slip (right) cases for  $Ra_L = 10^6$ .

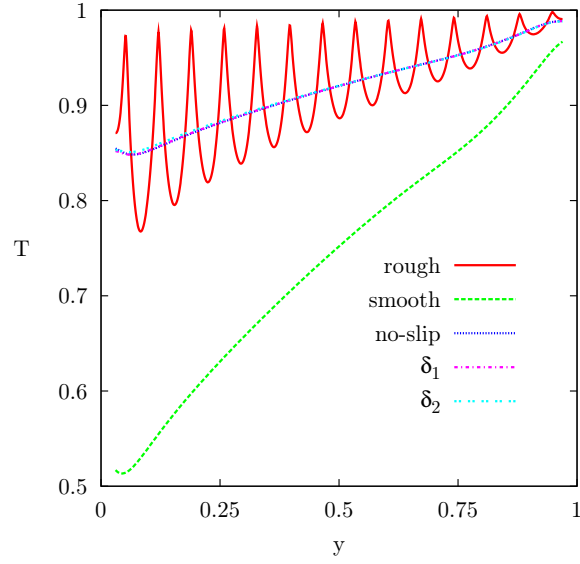
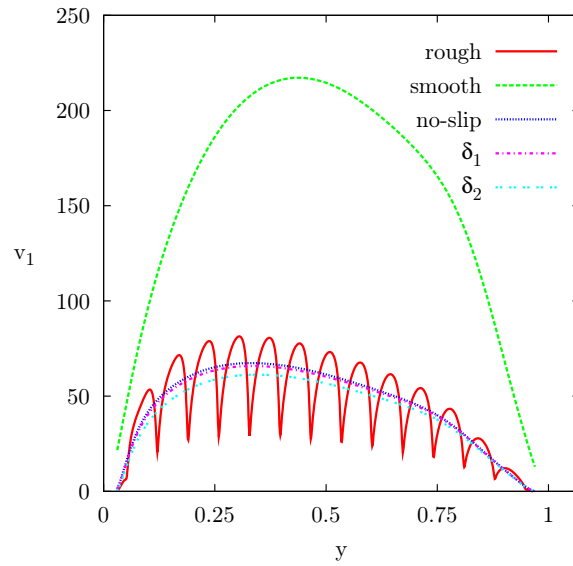
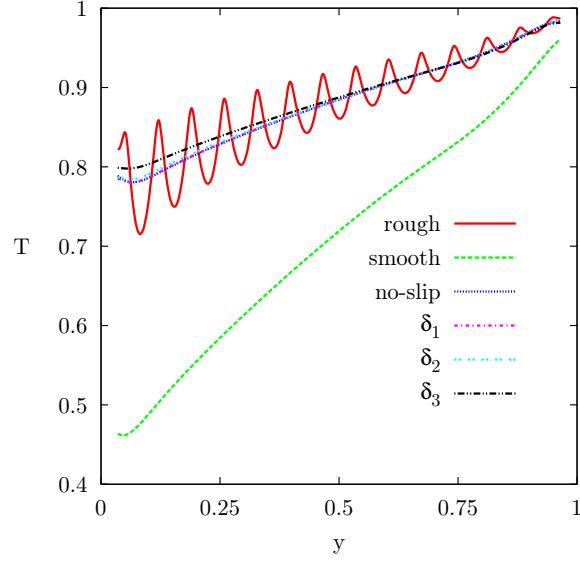
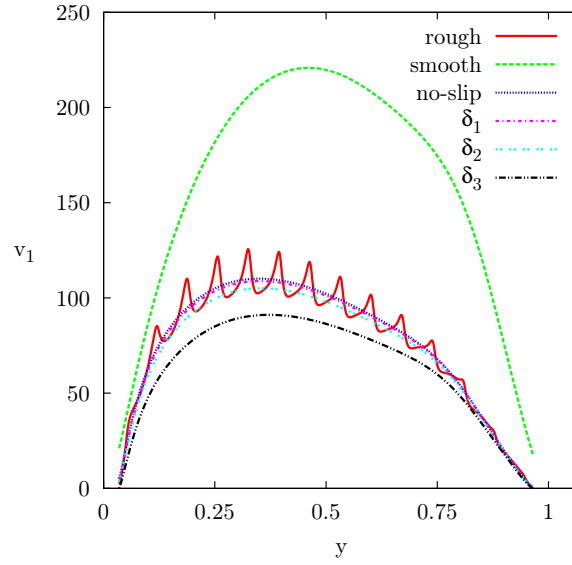

 (a) Temperature on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$ 

 (b) Velocity on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$ 

Figure II.12: Comparison of the temperature profiles (left) and the one of the y-component of the velocity field (right) on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$  for  $\text{Ra}_L = 10^6$  in the rough, smooth and effective cases.



(a) Temperature on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$



(b) Velocity on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$

Figure II.13: Comparison of the temperature profiles (left) and the one of the y-component of the velocity field (right) on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$  for  $Ra_L = 10^6$  in the rough, smooth and effective cases.

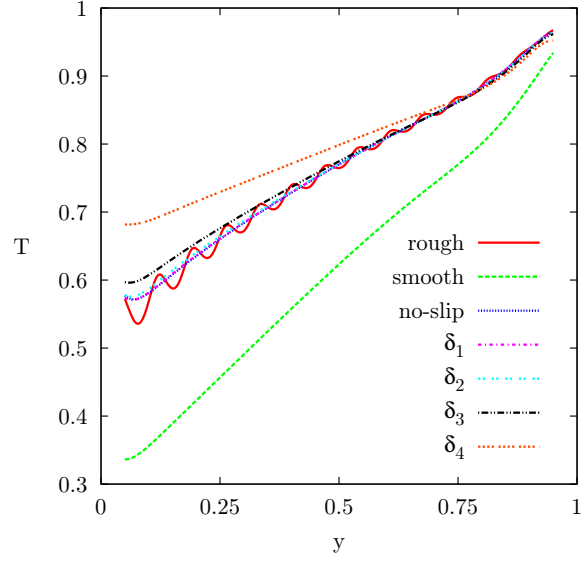
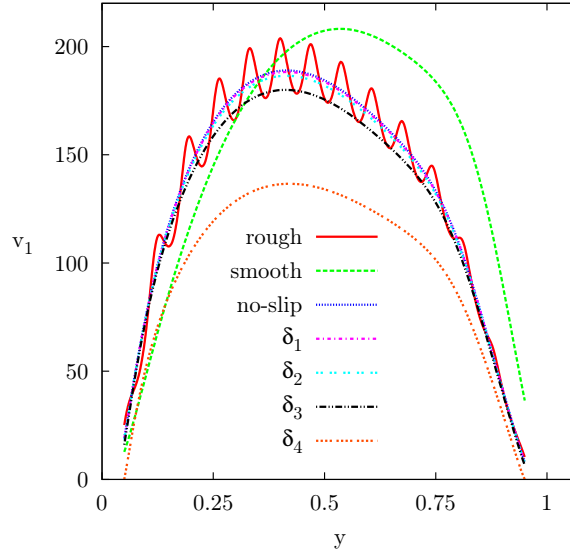

 (a) Temperature on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ 

 (b) Velocity on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ 

Figure II.14: Comparison of the temperature profiles (left) and the one of the y-component of the velocity field (right) on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$  for  $Ra_L = 10^6$  in the rough, smooth and effective cases.

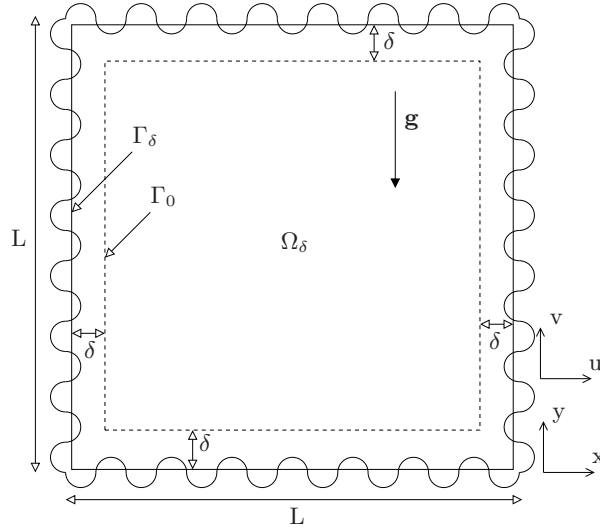


Figure II.15: Effective computational domain  $\Omega_\delta$

means that the no-slip boundary condition is recovered when the effective surface  $\Gamma_\delta$  is located at a distance  $L_1 = \delta_0 + B_{11}$ . This limiting case has been mentioned by Achdou *et al.* [3] and recently used by Veran *et al.* [149]. If we use the terminology employed in micro- and nanofluidics (*e.g.* [124]), the momentum effective condition given by (II.61) may be referred to as an effective stick-slip boundary condition for which the distance  $L_1$  is the effective stick-slip length and corresponds to the surface curvature contribution of the well-known slip length in the Navier boundary condition (*e.g.* [51, 124]). For instance, in the homogeneous case for which no surface curvature contribution is expected, we obviously find  $L_1 = 0$  since  $B_{11} = -\delta_0$  (*cf.* (II.29)). On the other hand, it is necessary that  $\delta \in [0, -B_{11}]$  to obtain a well-posed effective boundary value problem in  $\Omega_\delta$  with the effective condition (II.61). As far as the heat transfer problem is concerned, the same procedure is employed to define the effective boundary conditions (II.55) on  $\Gamma_\delta$ . This leads to the following first-order effective conditions

$$(BC1) \quad -\mathbf{n}_\delta \cdot \kappa \nabla T_{1,\delta} = h_\delta (T_{1,\delta} - T_w) \quad (II.62a)$$

$$(BC2) \quad -\mathbf{n}_\delta \cdot \kappa \nabla T_{1,\delta} = 0 \quad (II.62b)$$

where  $\mathbf{n}_\delta$  is the exterior normal to the effective surface  $\Gamma_\delta$  and  $h_\delta = -\kappa/(d + \delta)$ . Similarly to the momentum effective condition, the Robin boundary condition degenerates to an isothermal boundary condition (*i.e.*  $h_\delta \rightarrow \infty$ ) when  $\delta$  tends to  $-d$  or equivalently when the position of  $\Gamma_\delta$  is given by the effective length  $L_2$ . Moreover, to obtain a well-posed effective boundary value problem in  $\Omega_\delta$ , the effective surface has to be located such that  $\delta \in [0, -d]$ . Since we are interested in a coupled problem, the effective surface  $\Gamma_\delta$  has to be located such that  $\delta \in [0, \delta^*]$  where  $\delta^*$  can be seen as a lower bound defined by

$$\delta^* = \begin{cases} -B_{11} & \text{if } B_{11} < d \\ -d & \text{if } d < B_{11} \end{cases} \quad (II.63)$$

In this study,  $\delta^*$  is given by  $-B_{11}$ . For the numerical experiments, we have considered five different positions of  $\Gamma_\delta$  (*cf.* Tab.II.3). In the case denoted by “effective no-slip”, the no-slip boundary condition is recovered while in the other cases denoted by “effective  $\delta_i$ ”  $\Gamma_\delta$  is located higher and higher above the roughnesses. Before discussing the results, it must be emphasized that, in terms of computational cost, as clearly shown in Tab.II.4, the effective calculations are four to five less



Position of $\Gamma_\delta$	$\delta$
<i>effective no-slip</i>	$-B_{11}$
<i>effective <math>\delta_1</math></i>	$(\delta_0 - (\mathcal{A} - B_{11})) / 2$
<i>effective <math>\delta_2</math></i>	$\delta_0 - \mathcal{A}$
<i>effective <math>\delta_3</math></i>	$\delta_0 - (\mathcal{A} + 5.10^{-3})$
<i>effective <math>\delta_4</math></i>	$\delta_0 - (\mathcal{A} + 5.10^{-2})$

 Table II.3: Position of the effective surface  $\Gamma_\delta$ .

costly than the simulations performed in the rough domain, which justifies the use of an effective surface description.

DOFs	velocity	pressure	temperature
rough	929474	117925	464737
smooth	221778	27889	110889
<i>effective no-slip</i>	200978	25281	100489
<i>effective <math>\delta_i</math></i>	181202	22801	90601

Table II.4: Degree of freedoms (DOFs) involved in the numerical experiments.

The following results have been obtained. Figure (II.11) presents an example of comparison between the rough case and the *effective no-slip* case for  $\text{Ra}_L = 10^6$ . Results show that the effective conditions lead to a good approximation of the macro-scale behavior. Fig.II.12 to Fig.II.14 present some comparisons of the temperature and velocity profiles close to the hot wall on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$ ,  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$  and  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ . The different results show a good approximation of the averaged behavior of the rough surface for  $\delta_2 \leq \delta \leq -B_{11}$ . It is also interesting to remark that the best results are obtained in the *effective no-slip* case. The difference observed with the other effective results might be a consequence of the fact that the error committed to the vertical component of the velocity given by (II.61b) increases as the position of  $\Gamma_\delta$  increases. As illustrated in Fig.II.16 to to Fig.II.21, this trend is similar to the one observed for  $\text{Ra}_L \leq 10^7$ . On the contrary, none of the effective calculations provide a satisfying approximation of the averaged behavior of the rough surface for  $\text{Ra}_L = 10^8$ . This can be explained by the fact that the boundary layer thickness is lesser than the roughness amplitude and, in this case, the previous assumptions used to derive effective conditions are no longer valid. This result clearly points out the limits of application of our approach, which have been discussed in the theoretical section.

In addition to the temperature and velocity profiles, we have also compared the averaged Nusselt number calculated in the rough case  $\langle \text{Nu}_r \rangle$  with the one obtained in the effective cases  $\langle \text{Nu}_{\delta_i} \rangle$  (cf. Tab.II.5). The relative percentage errors observed on these values are summarized in Tab.II.6 and plotted in Fig.II.22. The graphs of the Fig.II.22 confirm the trend obtained with temperature and velocity profiles. Indeed, the effective surface models with  $\delta_2 < \delta \leq -B_{11}$  give an averaged Nusselt number similar to the one obtained in the rough case with an error lesser than 3% (*i.e.*  $\mathcal{O}(\epsilon)$ ) for  $\text{Ra}_L$  up to  $10^6$  and of order of 5% for  $\text{Ra}_L = 10^7$ . Once again, the *effective no-slip* case yields the best approximation.

All the results presented in this section clearly show that the location of the coupling surface has a great impact on the approximation of the averaged behavior of the rough surface even if the effective properties vary with the coupling surface. Moreover, it appears that an optimal location (in terms of the errors made) of  $\Gamma_\delta$  is given by the effective stick-slip length for  $10^3 \leq \text{Ra}_L \leq 10^7$ .

$Ra_L$	$10^3$	$10^4$	$10^5$	$10^6$	$10^7$	$10^8$
$\langle Nu_r \rangle$	1.0888	2.1005	4.1607	7.9304	14.2904	25.4061
$\langle Nu_{(no-slip)} \rangle$	1.0787	2.0856	4.1212	7.7668	13.6732	22.5516
$\langle Nu_{\delta_1} \rangle$	1.0738	2.0797	4.1085	7.7219	13.4858	21.8166
$\langle Nu_{\delta_2} \rangle$	1.0686	2.0716	4.0837	7.6151	13.0139	20.3128
$\langle Nu_{\delta_3} \rangle$	1.0578	2.0507	4.007	7.2935	11.8914	17.176356
$\langle Nu_{\delta_4} \rangle$	1.0223	1.9574	3.6572	6.072237	8.6836	10.9298

Table II.5: Average Nusselt number calculated on the hot wall. Comparison between the rough ( $\star_r$  quantities) case and the effective ( $\star_{(no-slip)}$  and  $\star_{\delta_i}$  quantities) cases for  $10^3 \leq Ra_L \leq 10^8$ .

$Ra_L$	$10^3$	$10^4$	$10^5$	$10^6$	$10^7$	$10^8$
$\langle Nu_{(no-slip)} \rangle$	0.9276	0.7094	0.9493	2.0620	4.3185	11.2357
$\langle Nu_{eff} \rangle (\delta_1)$	1.3740	0.9902	1.2541	2.6285	5.6300	14.1286
$\langle Nu_{eff} \rangle (\delta_2)$	1.8553	1.3759	1.8509	3.9749	8.7224	20.0475
$\langle Nu_{eff} \rangle (\delta_3)$	2.8472	2.3709	3.6771	8.0311	16.7870	32.3929
$\langle Nu_{eff} \rangle (\delta_4)$	6.1076	6.8127	24.034425	23.4305	39.2348	56.9797

Table II.6: Relative percentage error observed between  $\langle Nu_r \rangle$  and  $\langle Nu_{eff} \rangle$

The present study together with the one conducted by Veran *et al.* [149] lead us to think that such a position may be seen as the optimal position for laminar boundary flows over rough surfaces. It must be emphasized here that the optimum corresponds to a development with first-order approximations. Since the coupling surface is at first arbitrary, to some extent as discussed in the theoretical section, one may understand that the first-order corrections may be more or less accurate depending on the coupling surface location. Why is the suggested position optimum? In order to prove it, it will be interesting to tackle this question using higher order approximations. Equally, this result should also be checked in the case of more complex problems.

### II.3.6 Conclusion

The purpose of this work was to develop suitable effective surface models for laminar flows with heat transfer over rough surfaces. A model problem of laminar natural convection flow over rough surfaces in the frame of the Boussinesq approximation has been considered and tackled by means of an up-scaling technique based on the concept of domain decomposition.

Such a method allows to build an approximated solution that results in effective boundary conditions prescribed on a smooth effective surface. The associated effective properties, namely the effective friction and heat transfer coefficients, have been obtained by solving two local closure problems. The first of two depends only on the roughness geometry. As far as the effective heat transfer coefficient is concerned, the impact of the flow properties on its value has been analyzed. The obtained results lead us to conclude that, in the laminar case, the flow has a limited impact on the effective heat transfer coefficient, which can be approximated for most cases by its value in the purely diffusive case.

The validity of the proposed effective boundary conditions have been assessed on a laminar natural convection problem in a stamp shaped cavity for a wide range of macro-scale Rayleigh numbers. A very good agreement between the direct and the effective simulations have been

obtained for Rayleigh number up to  $10^7$  while the proposed effective surface models fail to be down for higher Rayleigh numbers. The momentum and heat transfer are clearly altered by the location of the effective surface for which the optimal position is given by the effective length at which the momentum effective condition degenerates into a no-slip boundary condition (*i.e.* the effective stick-slip length). On the other hand, this optimal choice does not allow to get rid of the micro-scale in some particular cases. For instance, when different types of roughnesses are considered or when a surface involves both a smooth homogeneous part and a rough heterogeneous area [149], this approach implies the presence of a step in the transition region characterized by the micro-scale  $\ell$ . However, this micro-scale step has a limited extent, compared to the area with roughnesses, thus giving still an advantage to the use of the optimal effective surface.

In the future, it will be interesting to extend this concept of effective surface models to more complex situations of practical interest involving for instance multiphase flows or/and ablation processes.

### II.3.A Derivation of the closure problems for the momentum transfer problem

In this appendix, we present the developments leading to the closure problems **I** and **II** given by the equations (II.25) and (II.26). The first step consists in introducing the linear representation of the spatial deviation terms (II.24) into the Stokes-like problem (II.23) and collecting all terms proportional to the macro-scale terms  $\mathbf{u}_{1,0}$  and  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$ . In doing so, we obtain two closure problems in the following form

• **Problem I.**  $\mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla \mathbf{a} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \nabla \mathbf{u}_{1,0} \cdot \mathbf{a} = \mu \nabla^2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mu \mathbf{A} \cdot \nabla^2 \mathbf{u}_{1,0} + 2\mu \nabla \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u}_{1,0} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.64a})$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mathbf{A}^T : \nabla \mathbf{u}_{1,0} = 0 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.64b})$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{I}) \cdot \mathbf{u}_{1,0} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.64c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot [-(\mathbf{a} \cdot \mathbf{u}_{1,0}) \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mu \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u}_{1,0}] = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.64d})$$

$$\mathbf{A}(x) = \mathbf{A}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.64e})$$

$$\mathbf{a}(x) = \mathbf{a}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.64f})$$

• **Problem II.**  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \nabla \mathbf{u}_{1,0} \cdot \mathbf{b} = \mu \nabla^2 \mathbf{B} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mu \mathbf{B} \cdot \nabla^2 \mathbf{u}_{1,0} + 2\mu \nabla \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u}_{1,0} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.65a})$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{B}) \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mathbf{B}^T : \nabla \mathbf{u}_{1,0} = 0 \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.65b})$$

$$(\mathbf{B} + y\mathbf{I}) \cdot \mathbf{u}_{1,0} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.65c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot [-(\mathbf{b} \cdot \mathbf{u}_{1,0}) \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{B} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mu \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u}_{1,0}] = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.65d})$$

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.65e})$$

$$\mathbf{b}(x) = \mathbf{b}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.65f})$$

Then, if we keep in mind that the spatial deviations are dominated by the length scale,  $\ell$ , and the macro-scale terms by the length scale,  $L$ , we can obtain the following estimates

• **Problem I.**  $\mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\mathcal{O}(\mathbf{A} \cdot \nabla^2 \mathbf{u}_{1,0}) \ll \mathcal{O}(\nabla \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u}_{1,0}) \ll \mathcal{O}(\nabla^2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.66a})$$

$$\mathcal{O}(\mathbf{A}^T : \nabla \mathbf{u}_{1,0}) \ll \mathcal{O}((\nabla \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.66b})$$

$$\mathcal{O}(\mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u}_{1,0}) \ll \mathcal{O}(\nabla \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.66c})$$

$$\mathcal{O}(\nabla \mathbf{u}_{1,0} \cdot \mathbf{a}) \ll \mathcal{O}(\nabla \mathbf{a} \cdot \mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.66d})$$

• **Problem II.**  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\mathcal{O}(\mathbf{B} \cdot \nabla^2 \partial_y \mathbf{u}_{1,0}) \ll \mathcal{O}(\nabla \mathbf{B} \cdot \nabla \partial_y \mathbf{u}_{1,0}) \ll \mathcal{O}(\nabla^2 \mathbf{B} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.67a})$$

$$\mathcal{O}(\mathbf{B}^T : \nabla \partial_y \mathbf{u}_{1,0}) \ll \mathcal{O}((\nabla \cdot \mathbf{B}) \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.67b})$$

$$\mathcal{O}(\mathbf{B} \cdot \nabla \partial_y \mathbf{u}_{1,0}) \ll \mathcal{O}(\nabla \mathbf{B} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.67c})$$

$$\mathcal{O}(\nabla \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \cdot \mathbf{b}) \ll \mathcal{O}(\nabla \mathbf{b} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0}) \quad (\text{II.67d})$$

The use of these estimates in Eqs.(II.66c)-(II.67c) immediately leads to the following form of the closure problems

• **Problem I.**  $\mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla \mathbf{a} = \mu \nabla^2 \mathbf{A} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.68a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.68b})$$

$$\mathbf{A} + \mathbf{I} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.68c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot [-\mathbf{a}\mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{A}] = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.68d})$$

$$\mathbf{A}(x) = \mathbf{A}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.68e})$$

$$\mathbf{a}(x) = \mathbf{a}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.68f})$$

• **Problem II.**  $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$  mapping

$$\nabla \mathbf{b} = \mu \nabla^2 \mathbf{B} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.69a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.69b})$$

$$\mathbf{B} + y\mathbf{I} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.69c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot [-\mathbf{b}\mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{B}] = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.69d})$$

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.69e})$$

$$\mathbf{b}(x) = \mathbf{b}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.69f})$$

### II.3.B Derivation of the closure problems for the heat transfer problem

In this appendix, our objective is to derive the closure problems **III** and **IV** for the mapping variables  $c$  and  $d$ . The procedure used here is similar to the one employed for the derivation of the closure problem **I** and **II**.

The first step consists in drawing upon the representation of the spatial deviation temperature given by (II.52) to obtain two closure problems in the form

- **Problem III.**  $(T_{1,0} - T_w)$  mapping

$$\begin{aligned} (T_w - T_{1,0}) \mathbf{u}_2 \cdot \nabla c + c \mathbf{u}_2 \cdot \nabla (T_w - T_{1,0}) &= (T_w - T_{1,0}) \kappa \nabla^2 c + \kappa c \nabla^2 (T_w - T_{1,0}) \\ &\quad + 2\kappa \nabla c \cdot \nabla (T_w - T_{1,0}) \quad \text{in } \Omega_i \end{aligned} \quad (\text{II.70a})$$

$$(\text{BC1}) \quad (c - 1)(T_w - T_{1,0}) = 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.70b})$$

$$(\text{BC2}) \quad (T_w - T_{1,0}) \mathbf{n} \cdot \nabla c + c \mathbf{n} \cdot \nabla (T_w - T_{1,0}) = 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.70c})$$

$$(T_w - T_{1,0}) \mathbf{n}_0 \cdot \nabla c + c \mathbf{n}_0 \cdot \nabla (T_w - T_{1,0}) = 0 \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.70d})$$

$$c(x) = c(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.70e})$$

- **Problem IV.**  $\partial_y T_{1,0}$  mapping

$$\begin{aligned} \partial_y T_{1,0} \mathbf{u}_2 \cdot \nabla d + d \mathbf{u}_2 \cdot \nabla (\partial_y T_{1,0}) &= \partial_y T_{1,0} \kappa \nabla^2 d + \kappa d \nabla^2 (\partial_y T_{1,0}) \\ &+ 2\kappa \nabla d \cdot \nabla (\partial_y T_{1,0}) \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.71a}) \end{aligned}$$

$$(\text{BC1}) \quad (d + y) \partial_y T_{1,0} = 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.71b})$$

$$(\text{BC2}) \quad d \mathbf{n} \cdot \nabla (\partial_y T_{1,0}) + \partial_y T_{1,0} \mathbf{n} \cdot \nabla d + \mathbf{n} \cdot \nabla T_{1,0} = 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.71c})$$

$$\partial_y T_{1,0} \mathbf{n}_0 \cdot \nabla d + d \mathbf{n}_0 \cdot \nabla (\partial_y T_{1,0}) = 0 \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.71d})$$

$$d(x) = d(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.71e})$$

To obtain useful forms of these two closure problems, we estimate here the order of magnitude of the different terms in the equations Eqs.(II.70)-(II.71). In doing so, we find

- **Problem III.**

$$\mathcal{O}(\kappa c \nabla^2 (T_w - T_{1,0})) \ll \mathcal{O}(2\kappa \nabla c \cdot \nabla (T_w - T_{1,0})) \ll \mathcal{O}((T_w - T_{1,0}) \kappa \nabla^2 c) \quad (\text{II.72a})$$

$$\mathcal{O}(c \mathbf{u}_1 \cdot \nabla (T_w - T_{1,0})) \ll \mathcal{O}((T_w - T_{1,0}) \mathbf{u}_1 \cdot \nabla c) \quad (\text{II.72b})$$

$$\mathcal{O}(c \mathbf{n} \cdot \nabla (T_w - T_{1,0})) \ll \mathcal{O}((T_w - T_{1,0}) \mathbf{n} \cdot \nabla c) \quad (\text{II.72c})$$

- **Problem IV.**

$$\mathcal{O}(\kappa d \nabla^2 (\partial_y T_{1,0})) \ll \mathcal{O}(2\kappa \nabla d \cdot \nabla (\partial_y T_{1,0})) \ll \mathcal{O}(\partial_y T_{1,0} \kappa \nabla^2 d) \quad (\text{II.73a})$$

$$\mathcal{O}(d \mathbf{u}_1 \cdot \nabla (\partial_y T_{1,0})) \ll \mathcal{O}(\partial_y T_{1,0} \mathbf{u}_1 \cdot \nabla d) \quad (\text{II.73b})$$

$$\mathcal{O}(d \mathbf{n} \cdot \nabla (\partial_y T_{1,0})) \ll \mathcal{O}(\partial_y T_{1,0} \mathbf{n} \cdot \nabla d) \quad (\text{II.73c})$$

At this stage, according to these estimates, the closure problems can be simplified in the form

- **Problem III.**  $(T_{1,0} - T_w)$  mapping

$$\mathbf{u}_1 \cdot \nabla c = \kappa \nabla^2 c \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.74a})$$

$$(\text{BC1}) \quad c = 1 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.74b})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla c = 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.74c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot \nabla c = 0 \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.74d})$$

$$c(x) = c(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.74e})$$

- **Problem IV.**  $\partial_y T_{1,0}$  mapping

$$\mathbf{u}_1 \cdot \nabla d = \kappa \nabla^2 d \quad \text{in } \Omega_i \quad (\text{II.75a})$$

$$(\text{BC1}) \quad d = -y \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.75b})$$

$$(\text{BC2}) \quad \mathbf{n} \cdot \nabla d + \mathbf{n} \cdot \nabla T_{1,0} = 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad (\text{II.75c})$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot \nabla d = 0 \quad \text{on } \Gamma_{0i} \quad (\text{II.75d})$$

$$d(x) = d(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad (\text{II.75e})$$

## II.4 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était de construire des conditions aux limites effectives pour des écoulements laminaires avec transferts de chaleur sur parois rugueuses dans le cadre de l'approximation de Boussinesq. Pour cela, nous avons considéré un problème modèle d'écoulement laminaire de convection naturelle et nous l'avons traité par une technique de changement d'échelle basée sur

le concept de décomposition de domaine. Cette méthode a permis de construire une solution approchée à l'échelle des rugosités et de développer des conditions aux limites effectives qui sont imposées sur une surface effective lisse homogène. Les propriétés effectives associées, c'est-à-dire un coefficient de frottement et un coefficient de transfert de chaleur effectifs, sont obtenues en résolvant des problèmes de fermeture locaux sur un motif représentatif des rugosités. Les conditions effectives ont ensuite été testées sur un problème de convection naturelle dans une cavité rugueuse différentiellement chauffée et la qualité de l'approximation proposée a été estimée en comparant pour différents nombres de Rayleigh les calculs effectifs à des calculs directs tenant compte des rugosités. Enfin, une étude numérique a également été menée sur le problème générique important du positionnement de la surface effective.

Pour les applications multiphasiques visées, le travail présenté dans ce chapitre constitue une première étape dans le cadre d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges. Nous rappelons néanmoins que le problème considéré ici peut être vu comme un problème modèle pour la modélisation des aspects hétérogènes des bétons des réacteurs actuels et de nouvelle génération.

La première contribution de ce travail de thèse correspondant au problème du changement d'échelle a été abordée dans ce chapitre. Nous allons désormais nous intéresser à la seconde contribution de ce travail qui concerne la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation.

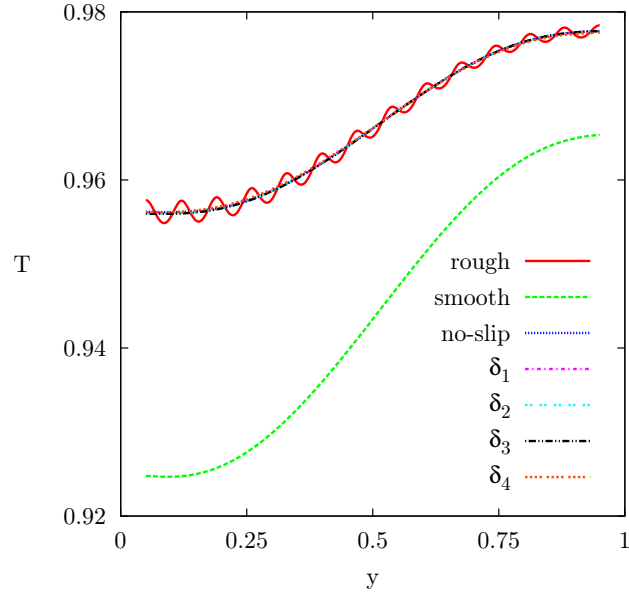
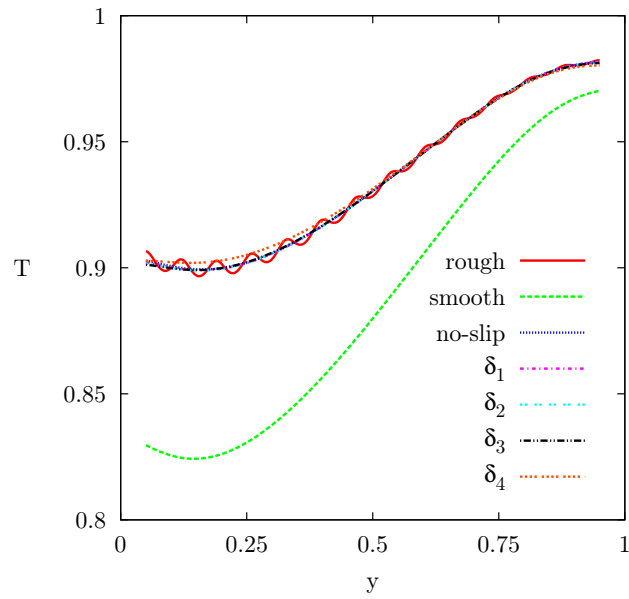

 (a)  $Ra_L = 10^3$ 

 (b)  $Ra_L = 10^4$ 

Figure II.16: Comparison of the temperature profiles in the rough, smooth and effective cases on  $x = \mathcal{A} + 5 \cdot 10^{-2}$  for  $Ra_L = 10^3$  (top) and  $Ra_L = 10^4$  (bottom).



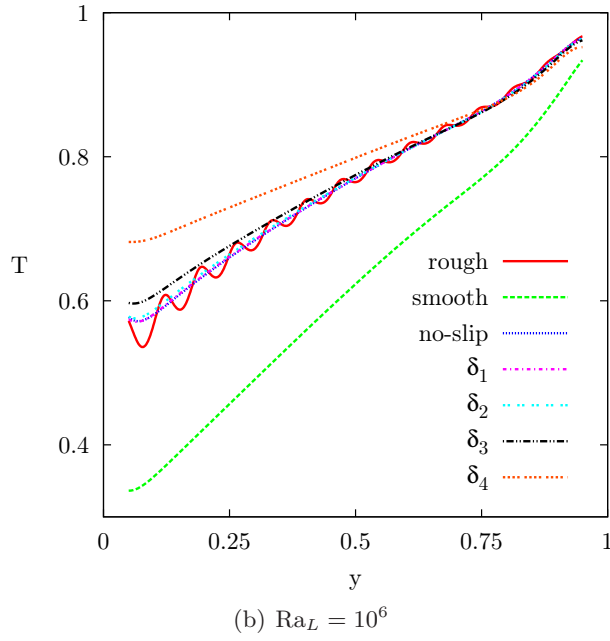
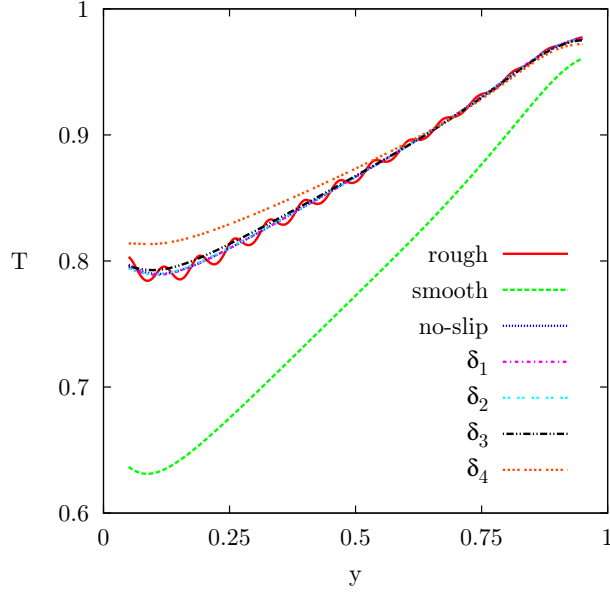


Figure II.17: Comparison of the temperature profiles in the rough, smooth and effective cases on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$  for  $Ra_L = 10^5$  (top) and  $Ra_L = 10^6$  (bottom).

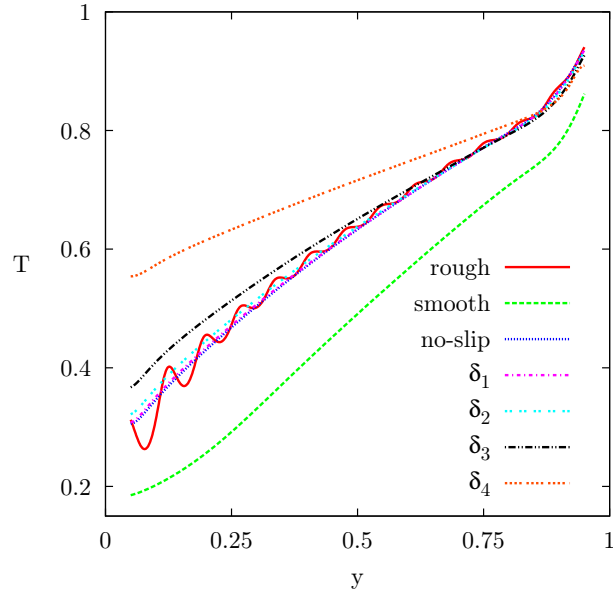
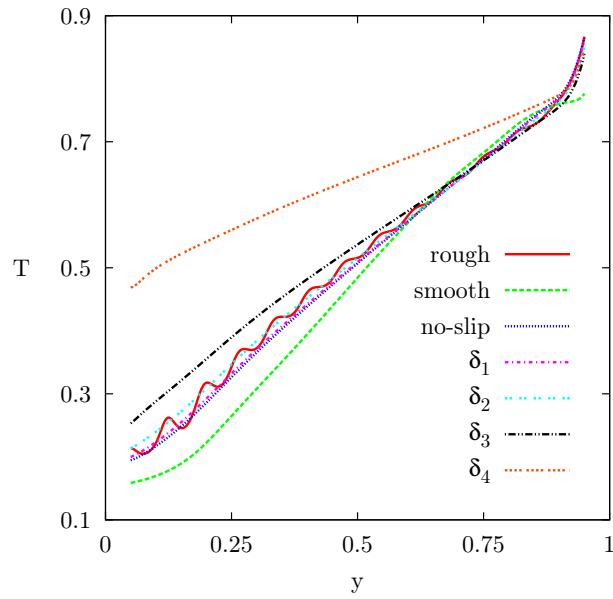
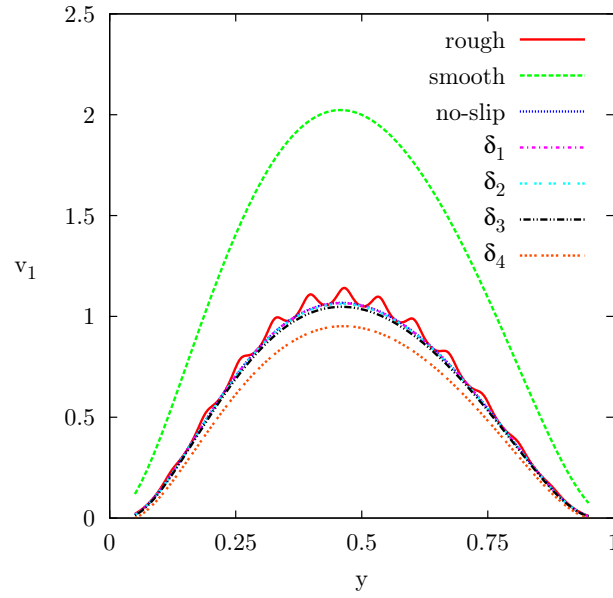
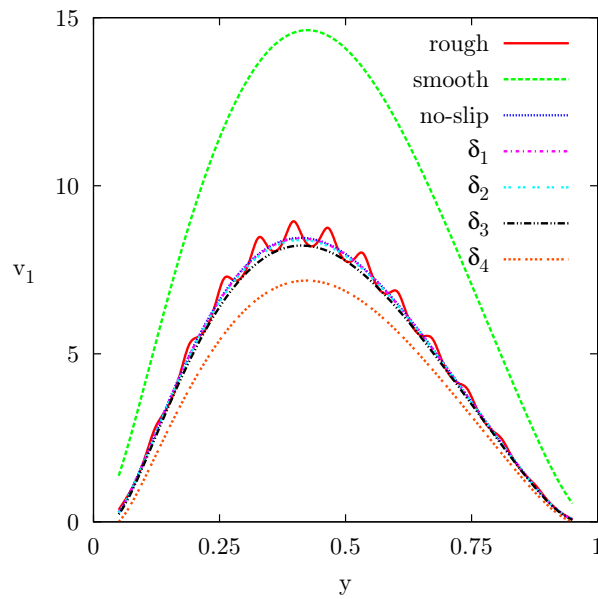

 (a)  $Ra_L = 10^7$ 

 (b)  $Ra_L = 10^8$ 

Figure II.18: Comparison of the temperature profiles in the rough, smooth and effective cases on  $x = \mathcal{A} + 5 \cdot 10^{-2}$  for  $Ra_L = 10^7$  (top) and  $Ra_L = 10^8$  (bottom).



(a)  $Ra_L = 10^3$



(b)  $Ra_L = 10^4$

Figure II.19: Comparison of the profiles of the  $y$ -component of the velocity field in the rough, smooth and effective cases on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$  for  $Ra_L = 10^3$  (top) and  $Ra_L = 10^4$  (bottom).

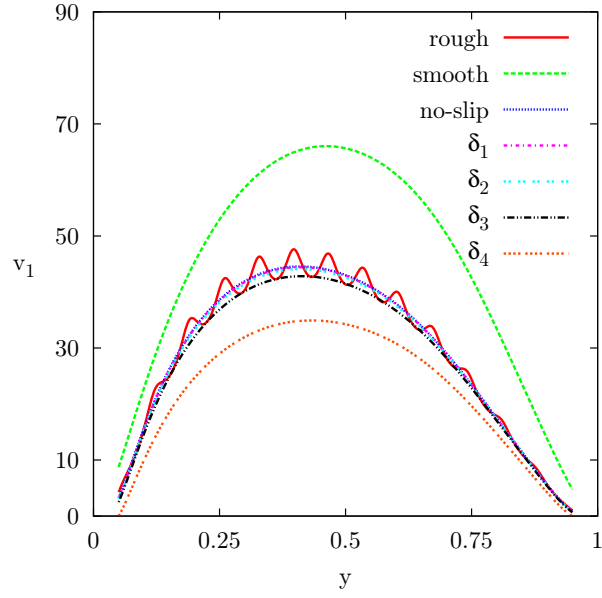
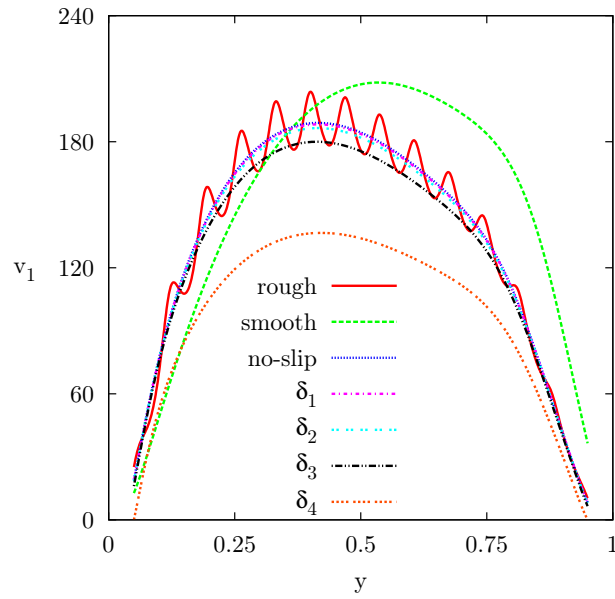
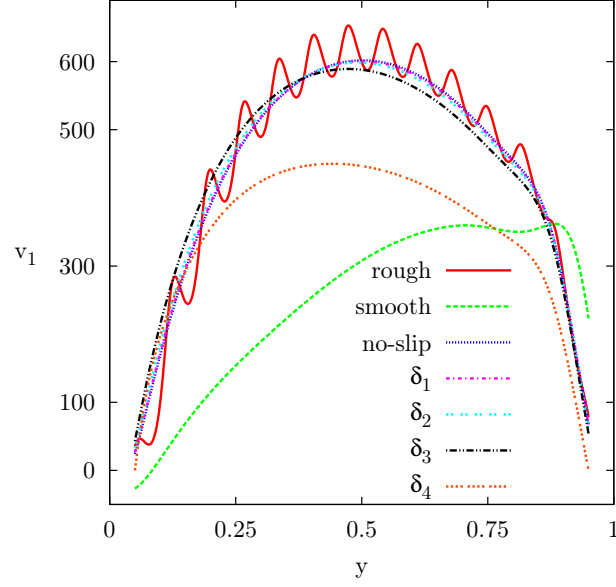
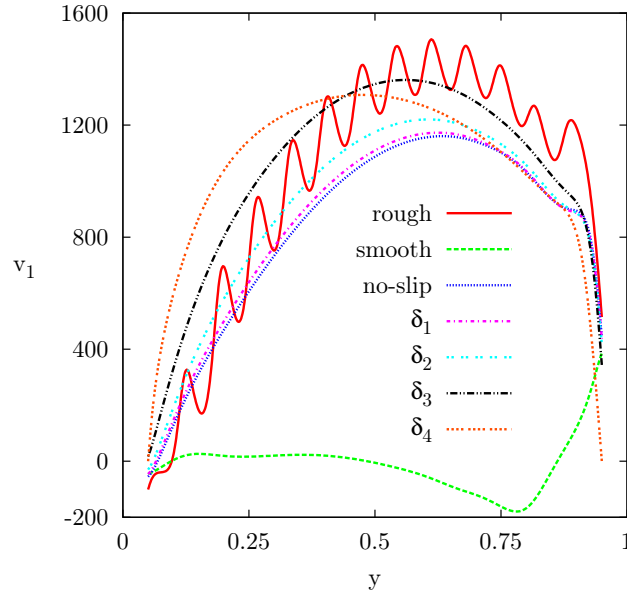

 (a)  $Ra_L = 10^5$ 

 (b)  $Ra_L = 10^6$ 

Figure II.20: Comparison of the profiles of the  $y$ -component of the velocity field in the rough, smooth and effective cases on  $x = \mathcal{A} + 5 \cdot 10^{-2}$  for  $Ra_L = 10^5$  (top) and  $Ra_L = 10^6$  (bottom).



(a)  $Ra_L = 10^7$



(b)  $Ra_L = 10^8$

Figure II.21: Comparison of the profiles of the  $y$ -component of the velocity field in the rough, smooth and effective cases on  $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$  for  $Ra_L = 10^7$  (top) and  $Ra_L = 10^8$  (bottom).

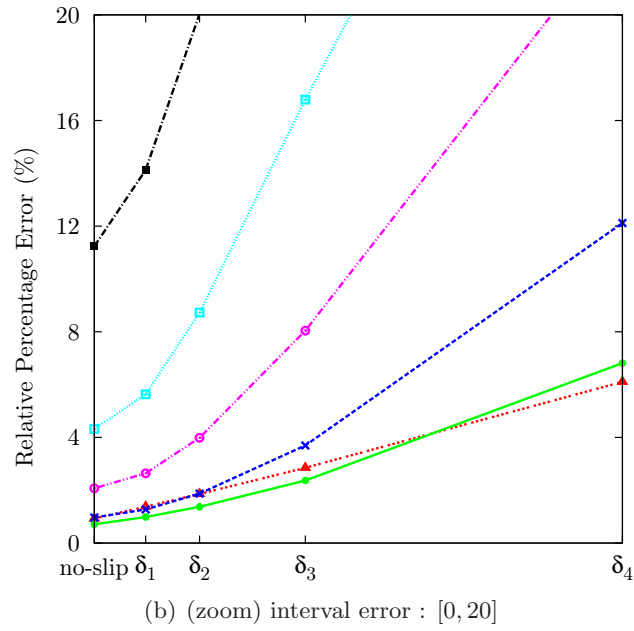
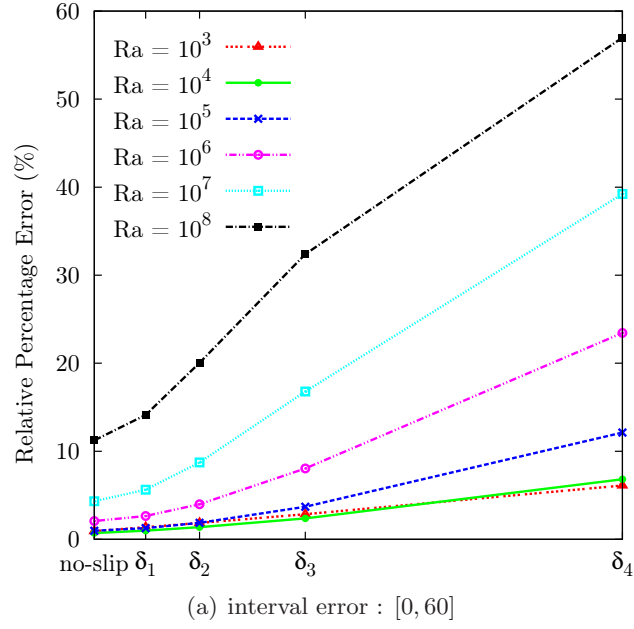


Figure II.22: Relative error percentage observed between the averaged Nusselt number in the rough case  $\langle Nu_r \rangle$  and the effective one  $\langle Nu_{eff} \rangle$  for  $10^3 \leq Ra_L \leq 10^8$ .





Lire  
la suite  
de la thèse